

**РАСЧЕТ  $g$ -ФАКТОРА В МАЛЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ**

А. М. Мандель<sup>1</sup>, В. Б. Ощурко<sup>1,2</sup>, С. Г. Веселко<sup>1</sup>,  
К. Г. Соломахо, С. М. Першин<sup>2</sup>, А. А. Шарц<sup>1</sup>

*Показано, что эффективное значение фактора магнитного расщепления электронов, локализованных на гетероструктурах типа малых квантовых точек, всегда формируется в виде разности двух величин. Первая из них относится к материалу самой точки и критически зависит от ее размеров и формы, вторая – к материалу барьера (окружающей матрицы), причем зависимость от последнего не исчезает ни при каких размерах квантовой точки. Известная  $(k, p)$ -теория Кейна, определяющая перенормировку массы и  $g$ -фактора электрона в объемных полупроводниках, модифицирована для малых квантовых точек с “недостроенной” зонной структурой. Конкретные расчеты энергии основного состояния электрона и его  $g$ -фактора проведены для ковариантной гетероструктуры  $InAs/AlSb$ , не локализующей дырки и потому способной формировать чистые одноэлектронные состояния (прототипы твердотельных кубитов).*

**Ключевые слова:** малые квантовые точки, перенормировка, фактор Ланде,  $(k, p)$ -теория Кейна, размерное квантование, кубиты.

Проблемы квантовой обработки информации на базе твердотельных гетероструктур [1] с необходимостью требуют четкого ответа на вопрос – как формируется фактор магнитного расщепления Ланде в квантовых точках малых (порядка нескольких нм) размеров. Наиболее перспективны в этом смысле квантовые точки, названные в обзоре [2] идеальными – их спектр содержит ровно одно связанное состояние, так что они являются “чистыми носителями” спиновой переменной. Однако до полной ясности в представлении о природе  $g$ -фактора упомянутых гетероструктур пока далеко. Напри-

<sup>1</sup> МГТУ “СТАНКИН”, Россия, Москва, Вадковский пер., 3А; e-mail arkadimandel@mail.ru.

<sup>2</sup> НЦВИ ИОФАН, Россия, Москва, Магистральная 5-я, д. 11.

мер, в работе [3] авторы задаются вопросом – как эффективное значение  $g$ -фактора сферических квантовых точек InAs/GaAs может быть *положительным* (что подтверждается экспериментом), если оба объемных значения – и в материале точки InAs ( $g_{in} = -14.5$ ), и в материале барьера GaAs ( $g_{ex} = -0.45$ ) *отрицательны*? Ясно, что никакой метод квантово-механического усреднения этого объяснить не может. Авторы [3] даже утверждают, что это – проявление ранее неизвестного эффекта (phenomenon of angular-momentum quenching). В более поздней работе [4] с участием тех же авторов, где рассматриваются цилиндрические квантовые точки InAs/InP ( $g_{ex} = 1.26$ ), эффективные значения  $g$ -фактора *отрицательны* даже для самых маленьких из рассмотренных точек. К сожалению, авторы даже не ставят самый важный, на наш взгляд, вопрос: чем обусловлены столь драматические различия с результатами предыдущей работы – составом материала барьера, формой квантовых точек или иными причинами?

По нашему мнению, ситуация с  $g$ -фактором обстоит следующим образом<sup>1</sup>. Пусть  $E$  – энергия связи (единственного) локализованного на квантовой точке электрона, отсчитываемая, как обычно в таких случаях, от дна зоны проводимости материала барьера. В магнитном поле  $B$  абсолютное значение этого уровня трансформируется следующим образом [5–8]

$$E_{\pm}(B) = E + \mu_B B \left( \frac{m}{m_{in}^*(R)} \pm \frac{g_{in}(R)}{2} \right). \quad (1)$$

Здесь индекс “+” соответствует ориентации спина вдоль магнитного поля, “–”, соответственно, против, первый член в скобках соответствует минимуму подзоны Ландау, формирующейся на каждом изолированном уровне в магнитном поле (первый уровень Ландау), а второй – энергии взаимодействия спина с магнитным полем (зеemanово расщепление),  $m$  – масса свободного электрона,  $\mu_B$  – магнетон Бора,  $m_{in}^*(R)$  и  $g_{in}(R)$  – соответственно эффективная масса и фактор Ланде в материале квантовой точки. Везде в дальнейшем мы будем рассматривать только сферические квантовые точки. Чтобы подчеркнуть отличие их параметров от объемных значений, мы явно указываем в этих обозначениях аргумент  $R$  – радиус квантовой точки.

---

<sup>1</sup>Везде в дальнейшем, во избежание дополнительной громоздкости, эффекты типа влияния на  $g$ -фактор граничных механических напряжений, его тензорную природу, нелинейную зависимость от магнитного поля и т.п. мы рассматривать не будем. Каждый из упомянутых эффектов несомненно заслуживает отдельного исследования.

Однако не следует забывать, что энергия дна зоны проводимости матрицы, от которой отсчитывается энергия связи, также трансформируется в магнитном поле по закону

$$E_{c\pm}(B) = \mu_B B \left( \frac{m}{m_{ex}^*} \pm \frac{g_{ex}}{2} \right), \quad (2)$$

где  $m_{ex}^*$  и  $g_{ex}$  – соответственно объемные значения эффективной массы и фактора Ланде в материале барьера. Таким образом, эффективное значение фактора Ланде для локализованного на квантовой точке электрона

$$\Delta E_- - \Delta E_+ = g^* \mu_B B, \quad (3)$$

причем знак выбран таким образом, чтобы более устойчивое состояние с большей энергией связи соответствовало при положительном  $g^*$  направлению спина против магнитного поля, как для свободных электронов. В результате из (1)–(3) получаем определение эффективного значения  $g$ -фактора в квантовых точках

$$g^* = g_{in}(R) - g_{ex}. \quad (4)$$

Отметим принципиальный момент – даже в пределе больших квантовых точек, когда “внутреннее” значение фактора Ланде  $g_{in}$  должно стремиться к его значению в соответствующей среде, эффективный  $g^*$ -фактор не перестает зависеть от значения  $g_{ex}$  в материале барьера. Этим наше определение принципиально отличается от целого ряда работ (напр., [1, 3] и т.д.). Наше определение сразу и автоматически разрешает мнимый парадокс результатов работ [3] и [4], о котором шла речь выше – отрицательное значение  $g_{ex}$ , как в GaAs, “работает” на положительное значение  $g^*$ , в то время как положительное значение  $g_{ex}$  в InP уменьшает эффективное значение  $g^*$ . Для объяснения этого нет необходимости придумывать новые эффекты типа “angular-momentum quenching” [3].

Вторая задача, без решения которой невозможно рассчитать  $g^*$  – определение внутренних характеристик малой квантовой точки  $g_{in}(R)$  и  $m_{in}^*(R)$ , когда расстояния между уровнями в ней сравнимы с шириной запрещенной зоны. Фактически – это частный случай общей проблемы размерного квантования – каков критерий того, что квантовая точка стала “кусочком” соответствующей среды.

Общепринято, что в объемных полупроводниках состава  $A^3B^5$  перенормировка массы и фактора Ланде правильно описывается известной  $(k, p)$ -теорией Кейна [9, 10]. Суть ее в том, что характеристики  $S$ -электрона в окрестности дна зоны проводимости перенормируются из-за смешивания с дырочными  $P$ -состояниями на вершине валентной зоны в сочетании со спин-орбитальным взаимодействием. Ясно, что в такой ситуации

решающим фактором, влияющим на величину перенормированных параметров, становится ширина запрещенной зоны. В самом деле,  $g$  меняется в довольно широких пределах от “свободного” значения 2 в широкозонных проводниках до весьма больших отрицательных значений в узкозонных материалах.

Не имея возможности в этой короткой заметке подробно описывать мотивировочную часть, приведем лишь результат нашей трансформации теории Кейна применительно к малым квантовым точкам с “недостроенной” зонной структурой. Суть этой трансформации можно выразить формулой

$$\varepsilon_g \rightarrow \varepsilon_g + \Delta E_c - E, \quad (5)$$

где  $\varepsilon_g$  – ширина запрещенной зоны в материале точки,  $\Delta E_c$  – скачок дна зоны проводимости на гетерогранице (он, естественно, играет роль глубины потенциальной ямы),  $E$  – энергия *основного* состояния электрона, локализованного на точке. Другими словами, расстояние по энергетической шкале между вершиной валентной зоны и минимумом зоны проводимости в объемном полупроводнике  $\varepsilon_g$  мы заменяем на расстояние между той же вершиной и основным состоянием электрона, локализованного на квантовой точке. Поскольку в дальнейшем мы будем вести расчеты для ковариантной гетероструктуры типа InAs/AlSb, трансформация на точке дырочных уровней матрицы нас беспокоить не должна. В результате для внутренних перенормированных значений эффективной массы и  $g$ -фактора получаем

$$\frac{1}{m_{in}^*(R)} = \frac{1}{m} + \frac{E_P[3(\varepsilon_g + \Delta E_c - E) + 2\Delta]}{3(\varepsilon_g + \Delta E_c - E)(\varepsilon_g + \Delta E_c - E + \Delta)}, \quad (6)$$

$$g_{in}(R) = 2 - \frac{2E_P\Delta}{3(\varepsilon_g + \Delta E_c - E)(\varepsilon_g + \Delta E_c - E + \Delta)}, \quad (7)$$

где  $E_P$  – энергия “перемешивания” Кейна,  $\Delta$  – энергия спин-орбитального взаимодействия в материале точки. Легко видеть, что эти выражения переходят в обычные формулы Кейна в пределе  $E \rightarrow \Delta E_c$ . Другими словами, критерий перехода перенормированных параметров электрона к своим объемным значениям в нашей модели следующий: щель между уровнями локализованных на точке электронов становится много меньше ширины запрещенной зоны.

Таким образом, чтобы замкнуть задачу расчета эффективного  $g^*$ -фактора, осталось определить энергию основного состояния локализованного на сферической точке электрона с учетом перенормировки его характеристик (6), (7). Кроме того, в плане проблемы квантовой обработки информации надо определить диапазон размеров квантовых

точек с только одним связанным уровнем. Эта задача во внешнем магнитном поле – правда, для постоянных значений  $g_{in}$  и  $m_{in}^*$  – решена, например, в наших работах [7, 8], а во внешнем электрическом поле – в [11]. В пределе небольших магнитных полей энергию уровня дает условие непрерывности логарифмической производной волновой функции связанного электрона на гетерогранице (см. также [12])

$$\operatorname{ctg} \left[ \sqrt{2m_{in}^*(R)[\Delta E_c - E]} \frac{R}{\hbar} \right] = - \sqrt{\frac{m_{ex}^* E}{m_{in}^*(R)[\Delta E_c - E]}}. \quad (8)$$

Численные расчеты в рамках предлагаемой модели (4), (6), (7), (8) выполнены для ковариантной гетероструктуры InAs/AlSb. Она наиболее подходит, насколько мы можем судить, для создания идеальных квантовых точек. Все численные данные о ее характеристиках ( $\Delta E_c$ ,  $\varepsilon_g$ ,  $\Delta$ , объемные значения  $m_{ex}^*$ ,  $m_{in}^*$ ) взяты из обзора [13]. Для сравнения экспериментальные данные по фактору Ланде в той же гетероструктуре – правда, в геометрии квантовых ям – приведены в работе [14].

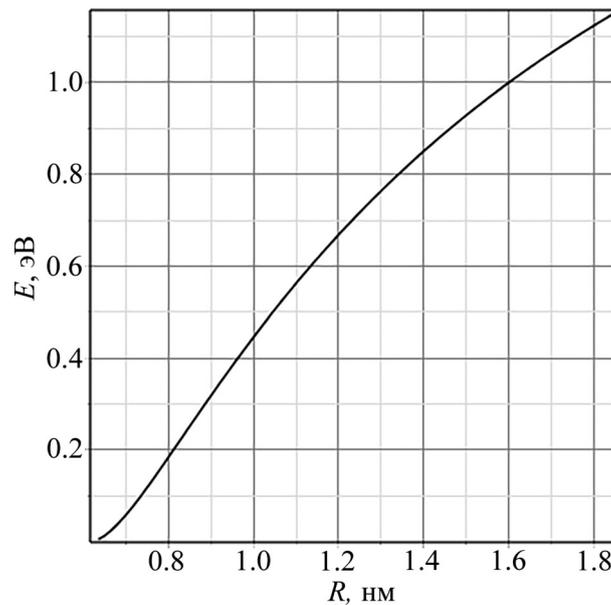


Рис. 1: Энергия связи  $E$  (эВ) единственного электронного уровня, локализованного на идеальной квантовой точке InAs/AlSb, в зависимости от ее радиуса  $R$  (нм) в диапазоне идеальности точки.

Рис. 1 иллюстрирует зависимость энергии связи (в эВ) единственного уровня для электрона, локализованного на сферической квантовой точке радиуса  $R$  (в нм), во всем диапазоне идеальности, с учетом перенормировки массы электрона. Первый связанный

уровень появляется в квантовой точке при критическом значении радиуса

$$R_{cr} = \pi \hbar / \sqrt{2m_{in}^*(R_{cr})\Delta E_c} \approx 0.61 \text{ нм}$$

(первый нуль  $\text{ctg}$  в левой части выражения (8)), а второй – при  $R = 3R_{cr} \approx 1.83 \text{ нм}$  – соответственно второй нуль  $\text{ctg}$  в (8) и верхний предел диапазона идеальности. Видно, что энергия связи с ростом радиуса точки растет довольно быстро.

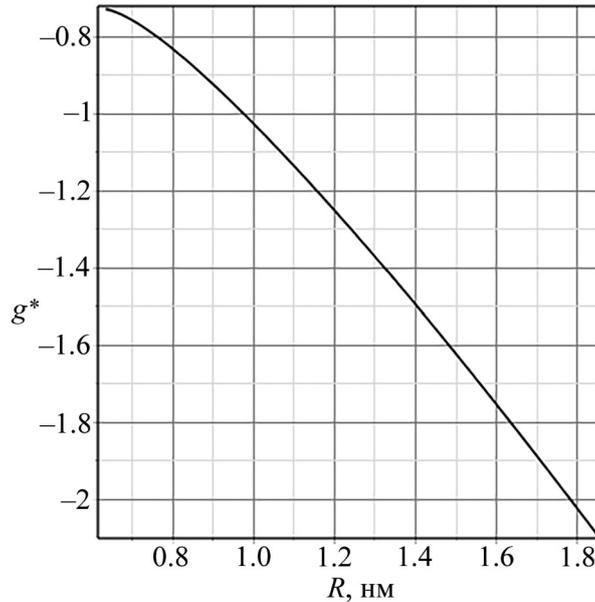


Рис. 2: Зависимость эффективного значения фактора магнитного расщепления  $g^*$ , локализованного на идеальной квантовой точке  $\text{InAs}/\text{AlSb}$ , от радиуса точки  $R$  (нм) в диапазоне идеальности точки.

На рис. 2 показана зависимость эффективного значения фактора Ланде от радиуса квантовой точки в том же диапазоне идеальности. Он сразу начинается с отрицательных значений, что, как легко видеть из (4), обусловлено прежде всего значением  $g_{ex} = 1.9$  в материале барьера. В пределах рассматриваемого диапазона  $g$ -фактор меняется почти в три раза. Своего объемного значения  $g^* \approx -14.8 - 1.9 = -16.7$  он достигает, как показывают расчеты, при  $R \sim 10$  нм. Ясно, что такой значительный интервал изменений наряду с чувствительностью к внешним воздействиям делает фактор Ланде довольно удобным объектом для внешнего управления спиновой степенью свободы.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проект № 17-07-00380 и Министерства образования и науки Российской Федерации (грант № 3.6634.2017/6.7).

## Л И Т Е Р А Т У Р А

- [1] Е. Л. Ивченко, УФН **128**(8), 869 (2012).
- [2] В. М. Леденцов, В. М. Устинов, В. А. Щукин и др., ФТП **32**(4), 385 (1998).
- [3] С. Е. Pryor, М. Е. Flatte, Phys. Rev. Lett. **96**(20.01), 026804 (2006).
- [4] J. Van Bree, А. Yu. Silov, Р. М. Koenraad, et al., Phys. Rev. B **85**, 165323 (2012).
- [5] В. Н. Родионов, Г. А. Кравцова, А. М. Мандель, Письма в ЖЭТФ **78**(4), 253 (2003).
- [6] В. Н. Родионов, Г. А. Кравцова, А. М. Мандель, ТМФ **164**(1), 157 (2010).
- [7] С. Н. Григорьев, А. М. Мандель, В. Б. Ошурко, Г. И. Соломахо, Оптический журнал **82**(5), 3 (2015).
- [8] А. М. Мандель, В. Б. Ошурко, Г. И. Соломахо, А. А. Шарц, РЭ **60**(10), 1073 (2015).
- [9] Е. О. Кане, J. Phys. Solids, No. 1, 249 (1957).
- [10] L. M. Roth, В. Lax, S. Zwerling, Phys. Rev. **114**, 90 (1959).
- [11] А. М. Мандель, В. Б. Ошурко, Квантовая электроника **48**(1), 49 (2018).
- [12] А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике* (М., Наука, 1966).
- [13] I. Vurgaftman, J. R. Meyer, Ram-Mohan, J. Appl. Phys. **89**, 5815 (2001).
- [14] В. Я. Алешкин, В. И. Гавриленко, А. В. Иконников и др., ФТП **42**(7), 846 (2008).

Поступила в редакцию 26 июля 2018 г.