

# СПИНОВЫЙ РЕЗОНАНС В КВАНТОВОЙ ТОЧКЕ НА КРАЮ ТОПОЛОГИЧЕСКОГО ИЗОЛЯТОРА ПРИ УЧЕТЕ СОСТОЯНИЙ КОНТИНУУМА

*Д. В. Хомицкий\**, *К. С. Кабаев*, *Е. А. Лаврухина*

*Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н. И. Лобачевского,  
физический факультет  
603950, Нижний Новгород, Россия*

Поступила в редакцию 6 мая 2020 г.,  
после переработки 5 июня 2020 г.  
Принята к публикации 5 июня 2020 г.

Исследуется динамика электронных состояний под действием периодического электрического поля, приложенного к квантовой точке, созданной магнитными барьерами на одномерном краю двумерного топологического изолятора на базе квантовой ямы HgTe/CdTe. Рассматривается конфигурация с двумя дискретными уровнями и учитываются переходы в состояния непрерывного спектра над барьерами. Рассчитывается частота осцилляций заселенностей дискретных уровней для различных амплитуд поля. Численно и аналитически показано, что учет непрерывного спектра приводит к затуханию суммарной заселенности дискретных уровней со временем. Определяются характерные времена этого затухания, отвечающего переходам в континуум. Рассчитывается динамика средних значений энергии, проекций спина и координат, а также локальных плотностей вероятности и спиновой плотности. Вычисляется усредненная во времени локальная плотность тока вероятности, описывающая покидание квантовой точки при переходах в непрерывный спектр. Результаты работы могут быть полезны при создании новых поколений устройств наноэлектроники и спинтроники на основе топологических изоляторов.

DOI: 10.31857/S0044451020110152

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Топологические изоляторы (ТИ) и структуры на их базе привлекают большое внимание в последние 15 лет [1–4]. Основное свойство ТИ — наличие хорошо проводящих состояний на краю образца, т. е. на поверхности для трехмерных ТИ и на одномерном крае для двумерных ТИ. Энергия краевых состояний в основном находится в запрещенной зоне спектра состояний в объемном образце. Такие краевые состояния устойчивы к рассеиванию на немагнитных примесях в силу требований симметрии по обращению времени и в ряде моделей характеризуются линейным, т. е. безмассовым законом дисперсии, причем проекция спина для каждой ветви дисперсии жестко связана с направлением групповой скорости. Такие системы называют фермионами Дирака или фермионами Вейля. Подобные особенно-

сти привлекают исследователей как с точки зрения фундаментальных свойств, так и с позиций перспективных приложений для создания новых поколений устройств для наноэлектроники и спинтроники. При этом, однако, возникают трудности, связанные с существенно делокализованным характером проявляемых топологических свойств, таких как нечувствительность к рассеиванию, и реализуемых прежде всего для распространяющихся вдоль края (или поверхности) состояний вида плоских волн или их комбинаций. Между тем для практического внедрения данных структур в экспериментальную или приборную базу, в том числе для создания с их помощью элементарных ячеек для квантовых вычислений (кубитов), желательно создавать на их основе компактные объекты, такие как квантовые точки.

Известно, однако, что осуществить конфайнмент электронных состояний в системе с линейным (безмассовым) спектром с помощью одних электростатических потенциалов невозможно. Возникающий при этом эффект прохождения через барьер при нормальном падении на него плоской волны назы-

\* E-mail: khomitsky@phys.unn.ru

вается клейновским туннелированием, и его существование предсказано в таких популярных системах с линейным спектром, как графен [5]. Поэтому для моделей с созданием конфайнмента придется привлекать либо предположения о существовании непроницаемых стенок [6], либо вводить магнитные барьеры для одномерных [7, 8] или поверхностных [9] краевых состояний. Наличие намагниченности, эквивалентное введению массового члена в гамильтониан [10], разрушает симметрию по отношению к обращению времени, лишая тем самым структуру некоторых свойств ТИ. Тем не менее ряд полезных особенностей фермионов Дирака сохраняется и при наличии локального магнитного поля, генерируемого магнитными барьерами. В первую очередь, это сильная связь спина с волновым вектором, позволяющая надеяться на приложения ТИ в спинтронике. Необходимо указать, что взаимодействие краевых состояний с магнитными неоднородностями структуры, такими как магнитные барьеры или локализованные неоднородности типа магнитных примесей, требует своего подхода для вывода гамильтониана в каждом конкретном случае. Так, для задачи о взаимодействии с магнитной примесью, которую можно рассматривать как сильнолокализованный барьер, такой вывод на основе модели Bernevig–Hughes–Zhang краевых состояний в ТИ HgTe/CdTe [1–4] представлен в Приложении (Supplementary Material) к работе [11].

Следует отметить, что в работах [7, 8] модель магнитных барьеров, создаваемых на одномерном крае двумерного ТИ на базе квантовой ямы HgTe/CdTe, была построена в приближении бесконечно тонких (дельта-образных) барьеров. При этом для создания конфайнмента требовалось переходить к пределу бесконечной амплитуды потенциальной энергии взаимодействия с таким барьером. В наших работах [12, 13] мы обобщили данную модель на случай более реалистичных барьеров конечной высоты и большой ширины, по сравнению с размером формируемой квантовой точки. Было обнаружено, что при изменении ширины ямы и высоты барьеров можно добиться формирования произвольного числа дискретных уровней в квантовой точке, в том числе получить систему из двух уровней, потенциально пригодную для создания кубитов. В работе [13] нами были найдены параметры энергетической релаксации в такой системе при участии фононов в HgTe. Было обнаружено, что при низких температурах (4 К или ниже) характерное время релаксации составляет для КТ шириной 40–45 нм величину 10–100 пс, что

позволяет рассчитывать на когерентную динамику состояний во внешнем управляющем поле на временах, меньших указанных.

В работе [13] нами подчеркивалось, что в модели квантовой точки с барьерами конечной высоты помимо состояний дискретного спектра существуют и состояния непрерывного спектра, располагающиеся выше и ниже области дискретного спектра. В нормальных условиях при низких температурах состояния нижней части континуума заняты, поскольку положение уровня Ферми должно обеспечивать занятость и нижнего дискретного уровня, который располагается выше верхнего края нижней части континуума. Тем не менее для более высоких температур (порядка 77 К) становятся существенными и переходы в состояния непрерывного спектра с участием фононов. Если же температуры низкие, то участие непрерывного спектра возможно, если к структуре приложено постоянное или переменное электрическое поле, что является необходимым условием осуществления с ней операций, требуемых для функционирования кубита.

Для системы с парой дискретных уровней, состояния которых отличаются знаком какой-либо проекции спина, переходы под действием периодического и однородного электрического поля обычно называют электрическим дипольным спиновым резонансом (ЭДСР). Такие переходы начали активно изучать в системах с сильным спин-орбитальным взаимодействием [14]. Роль состояний континуума при протекании ЭДСР в нанопроволоках с потенциалом квантовой точки изучалась, в частности, в наших недавних работах [15, 16]. Было показано, что для осуществления операций по управлению заселенностью нужного дискретного уровня на временах, существенно меньших времен релаксации, необходимо использовать такие электрические поля, которые являются достаточно сильными для индуцирования переходов в непрерывный спектр. Скорость ухода в континуум и ее влияние на параметры ЭДСР являются нетривиально связанными величинами. Можно предположить, что учет состояний непрерывного спектра в динамике, вызванной периодическим полем, представляет большой интерес и для моделей квантовой точки в ТИ, где могут проявиться особенности, характерные для дираковского, безмассового спектра.

В данной работе мы строим модель динамики электронных состояний в одномерной квантовой точке на базе ТИ HgTe/CdTe с магнитными барьерами, учитывая состояния непрерывного спектра, в которые возможны переходы под действием перио-

дического электрического поля. Мы рассчитываем эволюцию и заселенности дискретных уровней во времени при различных напряженностях электрического поля, находим частоту Раби и устанавливаем характерные времена ухода в непрерывный спектр. Явление ухода в континуум рассматривается с точки зрения динамики заселенностей, средней энергии и средней координаты, причем знание этих величин дополняет друг друга. Рассчитывается также локальная плотность вероятности и плотность одной из спиновых проекций в области квантовой точки, эволюция которых может быть детектирована экспериментально. Вычисляется локальная плотность тока вероятности вблизи квантовой точки, усредненная по времени, характеризующая интенсивность переходов в непрерывный спектр.

Работа построена следующим образом. В разд. 2 обсуждаются гамильтониан электронных состояний и его собственные функции для дискретной и непрерывной частей спектра, а также схема расчета эволюции в периодическом электрическом поле. В разд. 3 представлены основные результаты для динамики средних значений наблюдаемых величин, полученные при различных амплитудах поля, и приведены аналитические оценки вероятности ухода в непрерывный спектр. В разд. 4 обсуждаются результаты расчетов локальной плотности вероятности и спиновой плотности, а также плотности тока вероятности. В заключительном разд. 5 представлены выводы по работе. В приложении А обсуждается вывод гамильтониана для задачи с магнитными барьерами. В Приложении В рассматриваются различные способы включения в гамильтониан нестационарного электрического поля.

## 2. МОДЕЛЬ

### 2.1. Краевые состояния и спектр

Мы рассматриваем структуру, схематически показанную на рис. 1а. Квантовая яма HgTe/CdTe с толщиной, большей критической, при которой происходит формирование топологически защищенных краевых состояний, ориентирована в плоскости  $xu$ . Волновая функция краевого состояния локализована на краю  $x = 0$  и экспоненциально убывает в глубь структуры при  $x > 0$ . Координата  $y$  вдоль края является той единственной пространственной степенью свободы, которая входит в гамильтониан краевых состояний. В отсутствие магнитных барьеров и внешнего электрического поля такой гамильтониан для одномерных состояний, называемых ферми-

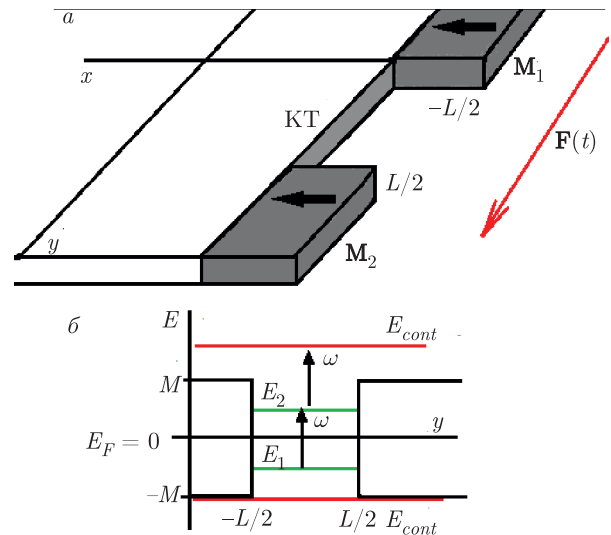


Рис. 1. а) Схема квантовой точки (КТ), сформированной магнитными барьерами высоты  $M_{1,2}$  и помещенной в переменное электрическое поле  $(0, F(t), 0)$ . Вариант ориентации намагниченности барьеров показан горизонтальными стрелками. Края структуры вдоль оси  $y$  ограничены только размерами рисунка. б) Расположение дискретных уровней  $E_{1,2}$  и состояний континуума  $E_{cont}$ . Электрическое поле с частотой  $\omega$  вызывает переходы между парой уровней  $E_{1,2}$ , а также между уровнем  $E_2$  и состояниями континуума с энергией  $E_{cont} > M$ . Положение уровня Ферми  $E_F = 0$

онами Дирака – Вейля, в базисе двухкомпонентных функций краевых состояний модели ТИ Bernevig–Hughes–Zhang (BHZ), локализованных вдоль координаты  $x$ , имеет вид [1–4]

$$H_{1D} = Ak_y \sigma_z. \tag{1}$$

Здесь  $\sigma_z$  – матрица Паули, а типичное значение постоянной  $A$ , связанной с групповой скоростью краевых состояний  $v_0 = A/\hbar = 5.5 \cdot 10^7$  см/с, для квантовых ям HgTe/CdTe составляет 360 мэВ · нм. Собственные значения гамильтониана (1) описывают две ветви с линейным законом дисперсии  $E_{1D} = \pm Ak_y$ , пересекающиеся в точке Дирака  $E = 0$ , причем проекции спина  $\langle \sigma_z \rangle$  на разных ветвях противоположны друг другу. Собственные функции гамильтониана (1) имеют вид плоских волн, умноженных на двухкомпонентный спинор. Они описывают состояния, распространяющиеся с постоянной скоростью  $v_0$  в противоположных направлениях вдоль оси  $y$ , в зависимости от проекции спина  $\sigma_z = \pm 1$  на одной из двух ветвей спектра  $E_{1D}$ . Среднее значение проекции спина, пропорциональное среднему значению от соответствующей матрицы Паули, здесь и далее мы откладываем в безразмерных единицах в интервале  $[-1 \dots 1]$ .

Для осуществления конфайнмента (локализации) краевых состояний и формирования дискретных уровней вслед за работами [7, 8] нами было предложено вводить в гамильтониан взаимодействия с магнитными барьерами. Намагниченность барьера  $\mathbf{m}$ , направленная под углом  $\theta$  к оси  $x$ , для ориентированного в плоскости  $xy$  магнитного барьера имеет компоненты  $(m \cos \theta, m \sin \theta, 0)$ . Взаимодействие магнитного барьера со спином электрона записывается в форме обменного оператора  $-(\mathbf{M} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = -M(\sigma_x \cos \theta + \sigma_y \sin \theta)$ , определяемого в базисе двух собственных состояний гамильтониана (1) с помощью матриц Паули  $\sigma_i$  второго порядка [1–4, 11, 17–20]. Здесь  $M$  обозначает амплитуду взаимодействия в энергетических единицах. Такая запись отвечает представлению в базисе псевдоспина, поскольку собственные состояния гамильтониана (1) хотя и имеют противоположные проекции спина на ось  $z$ , но отвечают комбинациям атомных функций электронной и дырочной зон с различными спинами, из которых строится функция краевых состояний. Следует отметить, что, несмотря на представление гамильтониана (1) в базисе псевдоспина, а не истинного спина, можно говорить о пропорциональности матриц-компонент вектора  $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$  оператору истинного спина [21]. Подробный вывод вклада для взаимодействия с магнитной примесью (которую можно рассматривать как сильнолокализованный магнитный барьер) в рамках модели ВNZ краевых состояний выполнен в работе [11], а случай нашей конфигурации магнитных барьеров рассмотрен в Приложении А в данной работе.

Рассмотрим барьеры с амплитудой взаимодействия  $M_{1,2}$  и ориентацией намагниченности, схематически показанной на рис. 1а стрелками внутри барьеров. Края структуры вдоль  $y$  ограничены только размерами рисунка, истинная структура является протяженной вдоль  $y$ . Направление намагниченности в плоскости  $xy$  определяется углами  $\theta_1$  и  $\theta_2$  соответственно для левого и правого барьеров. Величина  $M_{1,2}$  зависит от типа устанавливаемых магнитных барьеров и в нашей модели не превосходит 20 мэВ, т. е. порядка половины ширины запрещенной зоны в HgTe [1–4], в которой формируется спектр краевых состояний. Пусть барьеры имеют своими границами значения  $y = -L/2$ ,  $y = L/2$ , образующие границы квантовой точки (область КТ на рис. 1а), и являются толстыми, т. е. простираются достаточно далеко в отрицательном и положительном направлениях оси  $y$  по сравнению с характерной глубиной проникновения волновой функции. С учетом всех описанных

условий гамильтониан краевых состояний в присутствии барьеров может быть записан следующим образом [12, 13] (см. также Приложение А):

$$H_0 = Ak_y \sigma_z - M_1 S(-L/2 - y) (\sigma_x \cos \theta_1 + \sigma_y \sin \theta_1) - M_2 S(y - L/2) (\sigma_x \cos \theta_2 + \sigma_y \sin \theta_2), \quad (2)$$

где  $S(y)$  — ступенчатая функция, аппроксимирующая стенку левого и правого магнитного барьеров на границах соответственно  $y = -L/2$  и  $y = L/2$  и отвечающая бесконечно далекой второй стенке каждого барьера. Нами было показано [12, 13], что при изменении параметров барьеров и расстояния  $L$  между ними, т. е. размера квантовой точки, в ней может быть сформировано различное число дискретных уровней с энергиями  $|E_n| \leq \min(M_1, M_2)$ . Собственные функции гамильтониана (2) для состояния дискретного спектра с энергией  $E_n$  имеют различный вид в зависимости от пространственной области:  $\psi_{QD}$  внутри квантовой точки при  $-L/2 < y < L/2$ ;  $\psi_{y < -L/2}$  в левом барьере при  $y < -L/2$  и  $\psi_{y > L/2}$  в правом барьере при  $y > L/2$ . Для них нами были получены следующие выражения [12, 13]:

$$\psi_{QD} = \begin{pmatrix} C_1 \exp(iE_n y/A) \\ C_2 \exp(-iE_n y/A) \end{pmatrix}, \quad (3)$$

$$\psi_{y < -L/2} = B \begin{pmatrix} 1 \\ -\frac{i\sqrt{M_1^2 - E_n^2} + E_n}{M_1} \exp(i\theta_1) \end{pmatrix} \times \exp\left(\frac{\sqrt{M_1^2 - E_n^2}}{A} y\right), \quad (4)$$

$$\psi_{y > L/2} = D \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{i\sqrt{M_2^2 - E_n^2} - E_n}{M_2} \exp(i\theta_2) \end{pmatrix} \times \exp\left(-\frac{\sqrt{M_2^2 - E_n^2}}{A} y\right). \quad (5)$$

Коэффициенты  $C_1, C_2, B, D$  в выражениях (3)–(5) определяются из граничных условий при  $y = \pm L/2$ , описывающих непрерывность двухкомпонентной волновой функции и представляющих собой четыре скалярных, или два спинорных уравнения:

$$\begin{aligned} \psi(-L/2 + 0) &= \psi(-L/2 - 0), \\ \psi(L/2 + 0) &= \psi(L/2 - 0). \end{aligned} \quad (6)$$

После подстановки функций (3)–(5) в (6) мы получаем систему четырех линейных однородных

уравнений для коэффициентов  $C_1$ ,  $C_2$ ,  $B$ ,  $D$ . Условие существования нетривиального решения  $\Delta(E_n) = 0$  определяет дискретный спектр энергий.

Рассмотрим пример системы дискретных уровней для конкретных параметров задачи. Для значения  $A = 360$  мэВ · нм при параллельных магнитных барьерах с  $\theta_1 = \theta_2 = 0$ , имеющих одинаковую высоту  $M_1 = M_2 = M$  с  $M = 20$  мэВ, отвечающей примерно половине запрещенной зоны объемных состояний в HgTe, и для ширины квантовой точки  $L = 40$  нм, в ней формируется два дискретных уровня с энергиями, симметричными относительно точки Дирака  $E = 0$ , в которой мы далее будем считать расположенным уровень Ферми. Следует отметить, что положение уровня Ферми в конкретном образце топологического изолятора может быть различным [1–4], однако для нашей задачи важным является лишь такое условие для  $E_F$ , при выполнении которого нижний дискретный уровень  $E_1$  в состоянии равновесия занят, а верхний дискретный уровень  $E_2$  свободен, что может быть реализовано в достаточно широком интервале положения уровня Ферми. Энергии дискретных уровней, полученные численным расчетом, равны  $E_1 = -9.62$  мэВ и  $E_2 = 9.62$  мэВ. Схема энергетических уровней при выбранных параметрах задачи показана на рис. 1б.

Собственные функции для дискретных уровней обладают интересной особенностью, показанной на рис. 2: распределения плотности вероятности (рис. 2а,в) для них одинаковы, а распределения плотности проекции спина  $S_x$  (рис. 2б,г) имеют противоположный знак. Распределения для проекции  $S_y$  (не показаны на рис. 2) для этих уровней также одинаковы, а плотность для проекции  $S_z$  тождественно равна нулю. Такая особенность спиновой плотности позволяет рассчитывать на детектирование знака спиновой проекции  $S_x$  как на метод определения заселенности одного из двух дискретных уровней в экспериментах. Из рис. 2 можно также сделать вывод, что приближение бесконечно широких барьеров в (2) оправдано, поскольку волновые функции убывают в глубь барьеров на расстоянии, меньшем ширины квантовой точки. Следовательно, дальняя граница барьера, имеющаяся в реальных магнитах, не оказывает на локализованные состояния электрона существенного эффекта, если считать дискретные уровни не уширенными вследствие пусть малой, но конечной проницаемости реальной структуры с барьерами конечной ширины.

Помимо дискретных уровней в нашей модели с гамильтонианом (2) имеются и состояния непрерывного спектра, существующие при всех энергиях, удо-

влетворяющих условию [13]

$$|E| > \max(M_1, M_2). \quad (7)$$

Волновые функции состояний непрерывного спектра могут быть представлены в тех же пространственных областях, что и функции (3)–(5) дискретного спектра, в следующей форме:

$$\psi_{QD} = \begin{pmatrix} C_1 \exp(iEy/A) \\ C_2 \exp(-iEy/A) \end{pmatrix}, \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \psi_{y < -L/2} = & B_1 \left( \frac{1}{-E + \sqrt{E^2 - M_1^2}} \exp(i\theta_1) \right) \times \\ & \times \exp\left(i \frac{\sqrt{E^2 - M_1^2}}{A} y\right) + \\ & + B_2 \left( \frac{1}{-E - \sqrt{E^2 - M_1^2}} \exp(i\theta_1) \right) \times \\ & \times \exp\left(-i \frac{\sqrt{E^2 - M_1^2}}{A} y\right), \quad (9) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \psi_{y > L/2} = & D_1 \left( \frac{1}{-E + \sqrt{E^2 - M_2^2}} \exp(i\theta_2) \right) \times \\ & \times \exp\left(i \frac{\sqrt{E^2 - M_2^2}}{A} y\right) + \\ & + D_2 \left( \frac{1}{-E - \sqrt{E^2 - M_2^2}} \exp(i\theta_2) \right) \times \\ & \times \exp\left(-i \frac{\sqrt{E^2 - M_2^2}}{A} y\right). \quad (10) \end{aligned}$$

Коэффициенты  $C_1$ ,  $C_2$ ,  $B_1$ ,  $B_2$ ,  $D_1$ ,  $D_2$  в выражениях (8)–(10) определяются следующим образом. Четыре скалярных уравнения определяют непрерывность волновой функции на границах квантовой точки, и по форме совпадают с (6). Один из коэффициентов может быть задан произвольным ненулевым числом, поскольку волновая функция будет нормирована. Для обеспечения численной реализации состояний континуума нами предполагается существование далеких стенок, или электродов, расположенных на большом расстоянии  $y = \pm d$ , где  $d \gg \gg L$ . В этом случае континуум представляется набором очень плотного множества дискретных уровней

(порядка  $10^3$  на 100 мэВ), сохраняя при этом свои физически значимые свойства.

Подобная модель континуума с  $d = 160L$  была успешно применена нами при исследовании динамики в полупроводниковой нанопроволоке в [15, 16], поэтому мы рассчитываем на ее адекватность и для данной задачи, выбирая параметр  $d = 150L$ . Такой размер одномерной краевой области, дающий в нашем примере величину  $2d = 12$  мкм, отвечает реалистичным условиям экспериментов, где используются образцы и меньшей длины. Следует отметить, что нами выполнялись расчеты и при других значениях  $d$  в той же области параметров, и все физически значимые результаты для эволюции при этом от конкретного значения  $d$  не зависели. После задания значения  $d$  мы используем периодическое граничное условие  $\psi(-d) = \psi(d)$ , позволяющее адекватно описать модель континуума, и нормируем на единицу волновые функции (8)–(10) на полной длине краевой области  $2d$ . В результате для любого значения энергии непрерывного спектра, удовлетворяющего условию (7), мы получаем шесть уравнений для шести коэффициентов для волновых функций (8)–(10), однозначно определяющих собственное состояние, принадлежащее непрерывному спектру.

На рис. 1б красными горизонтальными линиями схематически показаны некоторые состояния континуума. Стрелки показывают возможные переходы в периодическом электрическом поле, рассматриваемые в следующем разделе. Заметим, что условие (7) говорит о существовании двух симметричных областей континуума с  $E > M$  и  $E < -M$ , где  $M = \max(M_1, M_2)$ . Поскольку для рассматриваемой нами задачи температура предполагается низкой и нижний дискретный уровень предполагается занятым в состоянии равновесия, будут заняты и все состояния нижней половины континуума с  $E < -M$ . Следовательно, влияние состояний непрерывного спектра будет реализовываться только в переходах в верхнюю часть континуума с  $E > M$ , что отражено вертикальной стрелкой на рис. 1б, указывающей на переходы с дискретного уровня  $E_2$  в верхнюю половину состояний континуума. Отметим, что поскольку для гамильтониана (2) принято приближение бесконечно широких барьеров, состояния континуума в нем отвечают «пространственно-надбарьерной» области и нигде не описываются простым выражением (1) для гамильтониана Дирака – Вейля в отсутствие барьеров. В дальнейших работах мы планируем учесть наличие и второй границы для каждого барьера, чтобы в задаче, по крайней мере далеко от квантовой точки, возникали облас-

ти токнесущих краевых состояний, описываемые гамильтонианом (1), что позволит рассчитать полный ток через всю структуру. В данной работе наша система «квантовая точка + барьеры» находится в «закрытом» режиме [7, 8], когда полный ток через нее отсутствует.

## 2.2. Схема расчета эволюции во внешнем поле

Нас интересует нестационарная эволюция электронного состояния, локализованного в начальный момент времени на нижнем дискретном уровне  $E_1$ , находящемся под уровнем Ферми  $E_F = 0$ . Эволюция индуцируется переменным электрическим полем  $\mathbf{F}(t) = (0, F(t), 0)$  показанным стрелкой на рис. 1а вдоль края  $x = 0$ . Здесь  $F(t) = |e|\mathcal{E}(t)$  есть величина электрического поля, измеряемая в мэВ/нм. Поскольку собственные функции гамильтониана (2) являются двухкомпонентными спинорами, у которых, вообще говоря, обе компоненты отличны от нуля, переходы между состояниями как дискретного, так и непрерывного спектра могут быть индуцированы периодическим электрическим полем, подобно тому как это имеет место при ЭДСР в полупроводниковых нанопроволоках с квантовой точкой [15, 16], в которых имеется сильное спин-орбитальное взаимодействие. Включение переменного электрического поля в гамильтониан может осуществляться различным образом в зависимости от выбранной калибровки. Соответствующие различия обсуждаются в Приложении В к данной работе. В калибровке с использованием скалярного потенциала и однородного в пространстве электрического поля  $\mathbf{F}(t) = (0, F(t), 0)$ , использованной нами также в работах [15, 16], гамильтониан имеет следующий вид:

$$H = H_0 + Fy \sin \omega t, \quad (11)$$

где  $F = |e|\mathcal{E}_0$  – амплитуда электрического поля, измеряемая в мэВ/нм, а частота удовлетворяет условию резонанса между двумя дискретными уровнями квантовой точки,

$$\hbar\omega = E_2 - E_1. \quad (12)$$

Можно назвать такой резонанс спиновым, поскольку проекции спина  $S_x$  на уровнях  $E_1$  и  $E_2$  имеют противоположные знаки, как это видно на рис. 2б,г. Для выбранных параметров задачи  $\hbar\omega = 19.24$  мэВ, что отвечает частоте поля  $\omega = 2.93 \cdot 10^{13}$  1/с (линейная частота  $\nu = 4.66$  ТГц), при этом период поля  $T = 0.21$  пс. Такие высокие частоты возбуждения в терагерцевой области имеют то преимущество,

что явления ЭДСР, связанные со сменой заселенностей дискретных уровней, занимают малый интервал времени. В рассмотренных нами случаях они протекают на временах порядка  $(16-50)T$  в зависимости от амплитуды поля, т. е. от 3.4 до 10.5 пс. Это позволяет пренебрегать эффектами релаксации и декогерентности, а в случае экспериментальной реализации подобной структуры позволяет рассчитывать на ее высокое быстродействие и стабильность.

Следует отметить, что хотя источники переменного поля в терагерцевой области еще не получили очень широкого распространения, необходимость в их использовании для изучения явлений ЭДСР отмечается в недавних работах [16, 22]. Прогресс в их создании заметен на протяжении последних двух десятилетий [23, 24]. В частности, недавно представлены экспериментальные результаты импульсной (длительностью до 1 пс) генерации излучения со спектром частот, имеющего существенные вклады от гармоник вплоть до 70 ТГц [24]. Приводимые ниже результаты, полученные в рамках нашей модели, показывают, что постоянно действующий источник с единственной гармоникой на частоте  $\omega$  не является необходимым, и основные эффекты для смены заселенностей уровней могут быть получены на достаточно малом интервале времени 4–11 пс, что достаточно близко к длительности импульсов терагерцевых источников, полученной в работе [24].

Необходимо отметить, что для выбранных параметров задачи для некоторых состояний континуума с  $E_{cont} > M$  оказывается выполненным условие резонанса (12) для верхнего дискретного уровня  $E_2$  и состояния континуума с энергией  $E_{cont}$ , что проиллюстрировано верхней вертикальной стрелкой с обозначением  $\omega$  на рис. 1б. Это означает, что состояния континуума вовлекаются в резонанс и активно участвуют в динамике, что наблюдалось нами ранее для ЭДСР в полупроводниковой нанопроволоке, даже когда точное условие резонанса с состояниями непрерывного спектра не выполнялось [15, 16].

Полную волновую функцию во внешнем поле будем искать в виде ряда по всем собственным функциям гамильтониана (2), включая состояния непрерывного спектра:

$$\Psi(y, t) = \sum_n C_n(t) \exp\left(-\frac{iE_n t}{\hbar}\right) \psi_n(y). \quad (13)$$

После подстановки (13) в нестационарное уравнение Шредингера с гамильтонианом (11) получим систему обыкновенных дифференциальных уравнений для коэффициентов  $C_n(t)$  с начальным условием  $C_n(0) = \delta_{n1}$ . Следует отметить, что формально ряд

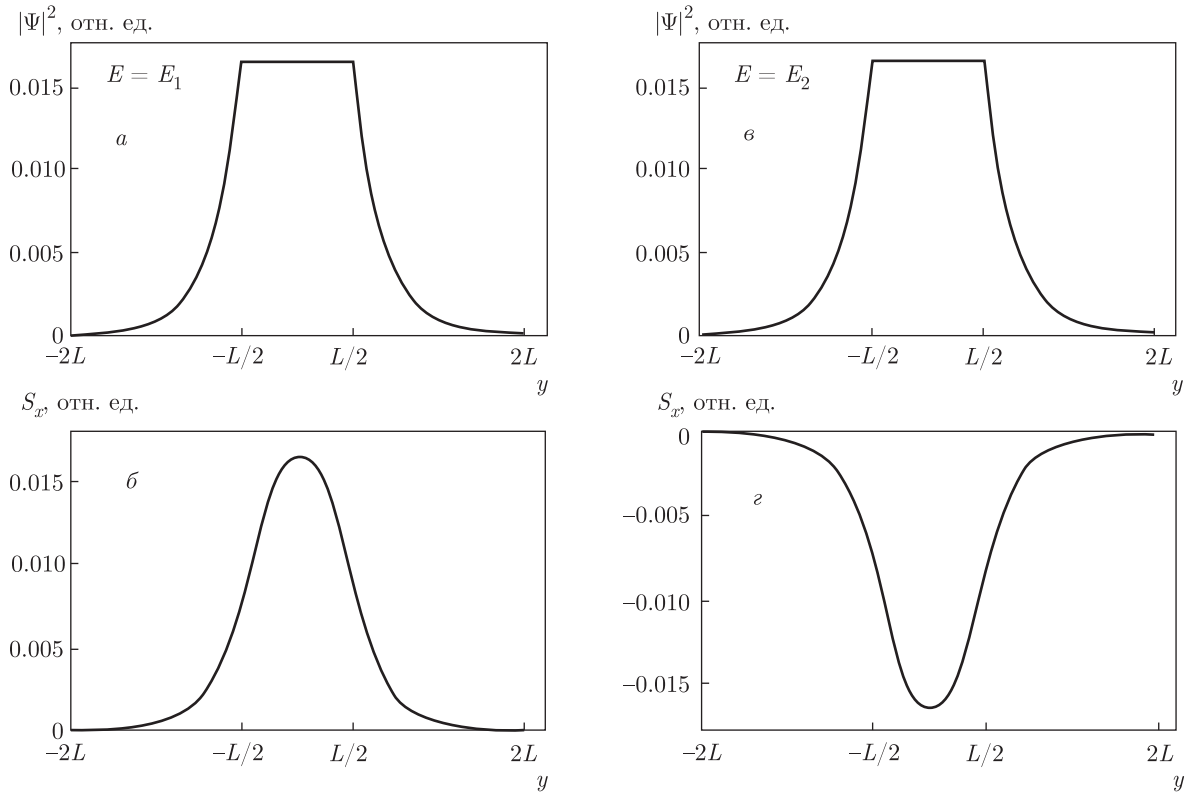
по собственным функциям должен содержать бесконечный набор базисных функций, однако в реальности при не слишком больших амплитудах электрического поля в динамику оказывается вовлечена только часть состояний континуума, непосредственно примыкающая к дискретным уровням в нижней части спектра. Наши расчеты показали, что в полях с амплитудой  $F = 0.03-0.09$  мэВ/нм на временах  $t \leq 150T$ , существенных для рассматриваемых эффектов, в динамике активно участвуют состояния континуума с энергией не выше 30 мэВ. Мы включали в численные расчеты все состояния континуума с энергией до 100 мэВ, и применяли при моделировании унитарной эволюции схему Кэли [25, 26], что обеспечивало сохранение нормы волновой функции. После получения решения (13) в данный момент времени в виде набора коэффициентов  $C_n(t)$  с их помощью могут быть определены все интересующие нас средние значения и локальные плотности, которые будут рассмотрены в следующих разделах.

### 3. РЕЗУЛЬТАТЫ ДЛЯ ЭВОЛЮЦИИ ЗАСЕЛЕННОСТЕЙ И СРЕДНИХ ЗНАЧЕНИЙ

#### 3.1. Эволюция заселенностей

Мы рассматривали эволюцию в периодическом электрическом поле с гамильтонианом (11) при четырех значениях напряженности поля:  $F = 0.03, 0.05, 0.07, 0.09$  мэВ/нм, на временах  $t \leq 150T$ . Такой интервал времени, занимающий около 32 пс, оказывается достаточным для наблюдения основных явлений, проистекающих от эволюции заселенности дискретной и непрерывной частей спектра.

Рассмотрим вначале эволюцию заселенности дискретных уровней, для которых в начальный момент времени  $C_1(0) = 1, C_2(0) = 0$ . На рис. 3а приведен пример эволюции величин  $|C_1(t)|^2$  (сплошная линия) и  $|C_2(t)|^2$  (штриховая линия) для амплитуды поля  $F = 0.05$  мэВ/нм. Можно видеть, что заселенности уровней, описываемые значениями  $|C_1(t)|^2$  и  $|C_2(t)|^2$ , испытывают характерные осцилляции, которые для строго двумерной системы называются осцилляциями Раби. Для  $F = 0.05$  мэВ/нм период таких осцилляций  $T_R$ , определяемый как расстояние между максимумами заселенности, равен примерно  $30T$ , что составляет 6.3 пс. Кроме того, на рис. 3а заметно затухание амплитуды осцилляций  $|C_1(t)|^2$  и  $|C_2(t)|^2$  со временем, что отражает переходы в состояния непрерывного спектра. Из рис. 3а можно сделать вывод, что при рассматриваемых параметрах задачи можно



**Рис. 2.** Распределения плотности вероятности (а,б) и  $S_x$ -компоненты спиновой плотности (в,г) для дискретных уровней  $E_1$  (а,в) и  $E_2$  (б,г), показанные в области квантовой точки  $-L/2 < y < L/2$  и в части области барьеров, примыкающей к ней

осуществить смену заселенностей на масштабе нескольких  $T_R$ , когда уход в континуум еще не проявляется заметно.

Зависимость частоты осцилляций заселенностей уровней  $|C_{1,2}|^2$ , или частоты Раби  $\Omega = 2\pi/T_R$  в строго двухуровневой модели с состояниями  $\psi_n$  и  $\psi_m$ , в приближении вращающейся волны (быстрые осцилляции на удвоенной частоте поля отбрасываются) имеет простой линейный вид как функция амплитуды электрического поля:

$$\Omega = \frac{F|\mathbf{r}_{nm}|}{\hbar}, \tag{14}$$

где  $\mathbf{r}_{nm} = \langle \psi_n | \mathbf{r} | \psi_m \rangle$  — матричный элемент оператора координаты для оператора возмущения от электрического поля, присутствующего в гамильтониане (11). На рис. 3б кружками изображена численная зависимость частоты  $\Omega$  в единицах  $\omega$  для смены заселенностей уровней  $E_1$  и  $E_2$ , полученная для рассматриваемых амплитуд электрического поля. Значение периода  $T_R$  составляет от  $50T$  для  $F = 0.03$  мэВ/нм до  $16T$  для  $F = 0.09$  мэВ/нм,

т. е. от 10.5 до 3.4 пс. Численные результаты хорошо согласуются с линейной зависимостью (14), построенной сплошной линией. Для нее использовано численно определенное значение матричного элемента координаты между двумя дискретными уровнями, модуль которого для наших параметров равен  $|y_{12}| = 13.19$  нм. Достаточно хорошее совпадение с линейной зависимостью имеет место, несмотря на участие в динамике многих уровней континуума. В этом состоит одно из отличий задачи с безмассовым спектром и однофотонным резонансом (12) с состояниями континуума от задач с квантовой точкой в полупроводниковой нанопроволоке, где зависимость частоты  $\Omega$  от амплитуды поля имеет существенно нелинейный характер [15, 16]. Анализ рис. 3б и формулы (14) приводит к очевидному выводу, что при увеличении амплитуды поля  $F$  процесс смены заселенностей протекает быстрее, однако при этом ускоряется и уход в состояния континуума, который будет рассмотрен ниже. Следовательно, в практических приложениях многоуровневой системы с учетом состояний континуума необходимо вы-



бирать некоторый оптимальный интервал электрических полей, определение которого составляет одну из целей данной работы.

### 3.2. Вероятность ухода в континуум

Взаимодействие состояний дискретной и непрерывной частей спектра в присутствии периодического электрического поля приводит к росту заселенностей состояний континуума и уменьшению заселенности немногочисленных дискретных уровней. Другими словами, электрон, первоначально находящийся в связанном состоянии, под действием периодического поля уходит в континуум, т. е. происходит ионизация квантовой точки. Явлению ионизации посвящена обширная литература, где представлено множество аналитических и численных подходов (см., например, [27, 28]). Мы начнем с анализа численных результатов для суммарной заселенности двух дискретных уровней в нашей модели, определяемой как

$$P_{loc}(t) = |C_1(t)|^2 + |C_2(t)|^2. \quad (15)$$

На рис. 4 сплошными линиями представлены временные зависимости (15) для выбранных амплитуд электрического поля, полученные при численном расчете эволюции. Штриховые линии описывают аналитическое приближение для суммарной заселенности, которое будет рассмотрено далее. Именно, будем аппроксимировать зависимость (15) на рис. 4 экспоненциальной кривой

$$P_{loc}(t) = P(0)e^{-w(F)t}, \quad (16)$$

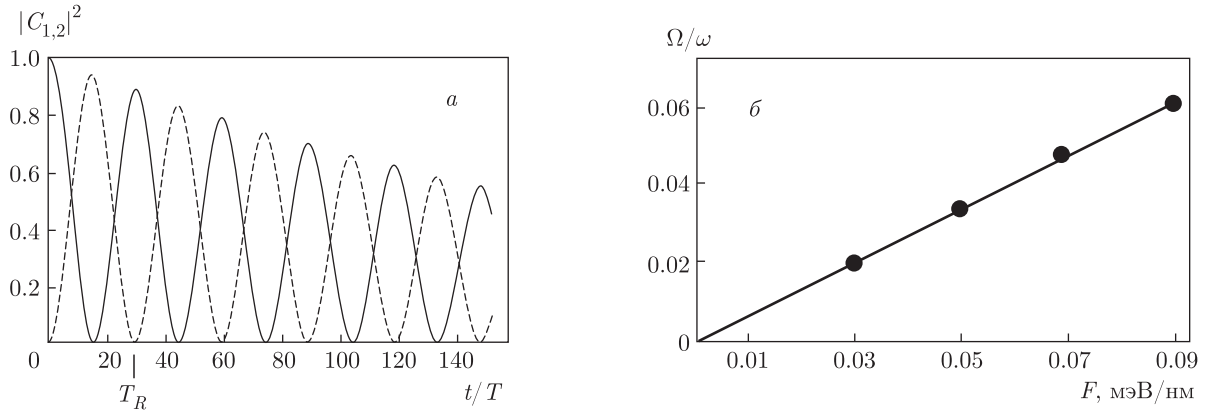
где  $P(0) = 1$ . Для уровня  $E_2$  дискретного спектра при рассматриваемых параметрах системы выполняется резонансное условие  $E_{cont} - E_2 = \hbar\omega$  с состоянием континуума с энергией  $E_{cont} \approx 28.86$  мэВ, лежащим выше барьера. Вероятность перехода в континуум в единицу времени,  $w(F)$ , фигурирующая в выражении (16), может быть оценена по золотому правилу Ферми как

$$w(F) = \frac{2\pi}{\hbar} |V_{if}|^2 \delta(E_f - E_i - \hbar\omega), \quad (17)$$

где  $E_i = E_2$  и  $E_f = E_{cont}$ . Значение матричного элемента  $V_{if} = Fy_{if}$  берется нами из численных расчетов собственных функций гамильтониана (2), а дельта-функция в (17) аппроксимируется соответствующей плотностью состояний, определяемой по численно найденному спектру гамильтониана (2). Зависимость  $w(F)$ , как это следует из (17),

имеет вид  $w \propto F^2$ , в отличие от экспоненциальных зависимостей для нелинейной многофотонной ионизации [27, 28]. Квадратичный рост вероятности  $w(F)$  по сравнению с линейным ростом частоты Раби (14) говорит о том, что для удержания электрона в связанном состоянии на уровне  $E_1$  или  $E_2$  в течение достаточно долгого времени не следует прикладывать к структуре слишком сильного электрического поля. С другой стороны, слишком слабые поля также не представляются подходящими, поскольку частота Раби (14) для смены заселенностей при этом уменьшается, характерное время «переключения» между двумя дискретными уровнями растет и наступившие эффекты релаксации и декогерентности приведут к усложнению и подавлению желаемой динамики заселенностей.

Результаты применения выражения (17) для использованного в расчетах набора амплитуд электрического поля приведены на рис. 4 в виде штриховых линий того же цвета, что и сплошные линии для численного расчета. Видно, что соответствие численных и аналитических результатов весьма хорошее, что позволяет говорить о данном механизме однофотонной ионизации как о доминирующем для нашей системы, и не рассматривать режимы нелинейной многофотонной ионизации. Характерные времена ухода в континуум, определяемые согласно выражению (16) как  $\tau = 1/w(F)$ , составляют от 633Т при  $F = 0.03$  мэВ/нм до 70Т при  $F = 0.09$  мэВ/нм, т. е. от 133 до 15 пс. Эти времена, хотя и позволяют осуществить требуемые операции по смене заселенностей дискретных уровней, рассмотренные в предыдущем разделе, являются все же достаточно малыми на масштабе быстрогодействия современных электронных приборов. Поэтому увеличивать амплитуду электрического поля выше рассмотренных в наших примерах значений представляется нецелесообразным. Уменьшение амплитуды приведет к росту времени ухода в континуум согласно закономерности  $\tau \propto 1/F^2$ . Однако при слишком слабых полях, как уже отмечалось выше, сами операции по смене заселенностей дискретных уровней (осцилляции Раби) будут протекать медленнее, в соответствии с приближением (14), что может привести к активному влиянию эффектов релаксации и декогерентности, характерный масштаб которых по времени начинается для типичных наноструктур от 1 нс и выше. Приведенные здесь и в предыдущем разделе оценки показывают, что для нашей структуры возможно осуществить операции типа осцилляций Раби на малом масштабе от 4 до 11 пс. При этом уход в континуум проявит себя на временах соответствен-



**Рис. 3.** а) Динамика заселенностей  $|C_1|^2$  (сплошная линия) и  $|C_2|^2$  (штриховая линия) дискретных уровней при резонансе (12) для напряженности поля  $F = 0.05$  мЭВ/нм. Видны осцилляции заселенности с периодом около  $30T$  (6.3 пс), амплитуда которых затухает вследствие развития переходов в непрерывный спектр. б) Зависимость частоты осцилляции заселенностей дискретных уровней  $\Omega$  (частоты Раби) от амплитуды поля  $F$ . Численные результаты, отмеченные кружками, хорошо соответствуют приближению (14), показанному сплошной линией

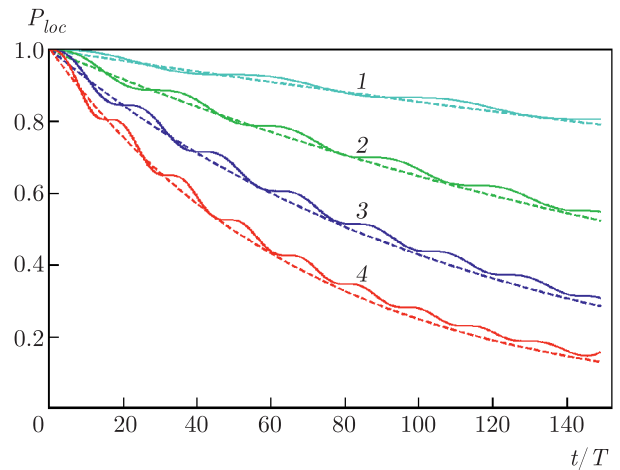
но от 15 до 133 пс, что позволит осуществить такие операции до наступления существенной вероятности ухода электрона в непрерывный спектр.

### 3.3. Эволюция средних значений энергии, спина и координаты

Еще одним инструментом для определения преимущественного вклада в состояние электрона от дискретной или непрерывной части спектра является анализ динамики средних значений физических величин. Под усреднением величины, описываемой оператором  $X$ , мы понимаем обычное квантовомеханическое усреднение в состоянии (13),

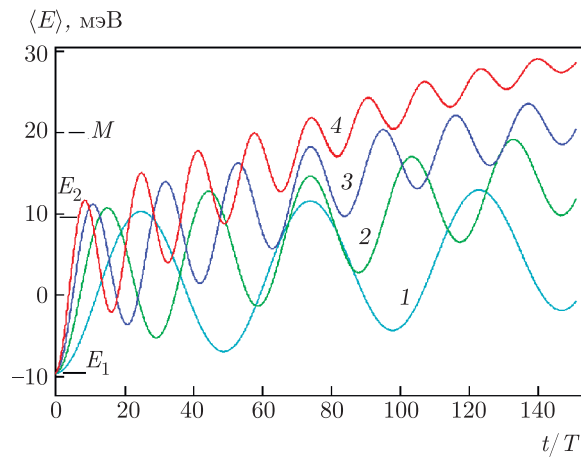
$$\langle X(t) \rangle = \langle \Psi(y, t) | X | \Psi(y, t) \rangle.$$

Рассмотрим вначале поведение средней энергии  $\langle E(t) \rangle$  со временем, показанное на рис. 5 для тех же амплитуд электрического поля, что на рис. 3б и 4. В начальный момент времени электрон локализован на нижнем дискретном уровне  $E_1$ , поэтому  $\langle E(0) \rangle = E_1$ . В системе только с двумя дискретными уровнями без учета континуума величина  $\langle E(t) \rangle$  менялась бы в интервале  $E_1 < \langle E(t) \rangle < E_2$ , т.е. от  $-9.62$  до  $9.62$  мЭВ, что показано на рис. 5 горизонтальными линиями и метками  $E_1, E_2$ . Из графиков эволюции  $\langle E(t) \rangle$  на рис. 5 видно, что при учете состояний континуума пределы изменения средней энергии существенно сдвигаются. Именно, для всех амплитуд поля имеет место рост среднего значения  $\langle E(t) \rangle$ , сопровождаемый осцилляциями, соответствующими осцилляциям Раби (см. рис. 3). Ха-



**Рис. 4.** (В цвете онлайн) Эволюция суммарной заселенности дискретных уровней (15), полученная численным расчетом (сплошные линии) и в рамках аналитического приближения (17) (штриховые линии), построенная для различных амплитуд электрического поля  $F$  [мЭВ/нм] = 0.03 (1), 0.05 (2), 0.07 (3), 0.09 (4)

рактерное время превышения средней энергией порогового значения, равного высоте барьера  $M$ , отвечает времени  $\tau = 1/w(F)$  затухания суммарной заселенности дискретных уровней  $P_{loc}(t)$ , показанной на рис. 4. Можно сказать, что в эволюцию средней энергии на рассматриваемом интервале времени дают основной вклад два дискретных уровня, но с течением времени состояния континуума начинают давать все более заметный вклад, в особенности для максимальных амплитуд электрического поля.



**Рис. 5.** (В цвете онлайн) Зависимости средней энергии  $\langle E(t) \rangle$  от времени, построенные для различных амплитуд электрического поля  $F$  [мэВ/нм] = 0.03 (1), 0.05 (2), 0.07 (3), 0.09 (4). Высота барьера  $M = 20$  мэВ отмечена горизонтальной линией и отметкой  $M$  вместе с энергиями дискретных уровней  $E_1$  и  $E_2$

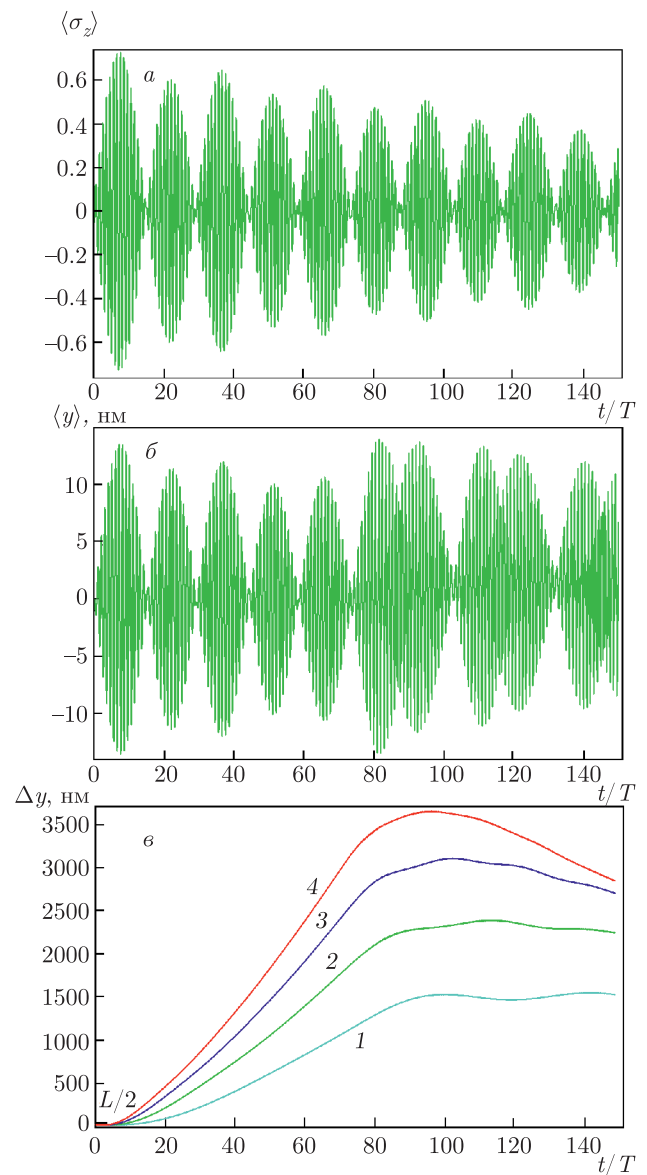
Другую полезную информацию о динамике электронных состояний можно получить, анализируя эволюцию среднего значения координаты  $\langle y(t) \rangle$ , что использовалось нами ранее для задач о динамике в полупроводниковой нанопроволоке [15,16]. При этом необходимо отметить важное отличие системы с безмассовым гамильтонианом (2) от обычной задачи в приближении эффективной массы. Именно, для гамильтониана (2) оператор скорости  $v_y = \partial H / \hbar \partial k_y$  имеет вид

$$v_y = \frac{A}{\hbar} \sigma_z. \quad (18)$$

Выражение (18) означает, что средняя скорость не может превышать амплитуду  $v_0 = A/\hbar$  и определяется динамикой среднего значения  $\langle \sigma_z \rangle$ , завися от амплитуды электрического поля лишь опосредованно. В периодическом поле на частоте  $\omega$  осцилляции  $\langle \sigma_z \rangle$  приводят к осцилляциям среднего значения координаты, амплитуду которых можно оценить как  $y_0 \sim v_0/\omega$ , что, согласно выражению (18), дает оценку

$$y_0 \leq \frac{A}{\hbar \omega}. \quad (19)$$

Вначале мы рассмотрим динамику среднего значения  $\langle \sigma_z \rangle$  для какого-то одного значения амплитуды поля  $F$ . На рис. 6а показана зависимость от времени  $\langle \sigma_z \rangle$  для  $F = 0.05$  мэВ/нм. Можно наблюдать как быстрые осцилляции на частоте поля  $\omega$ , так и более медленные осцилляции огибающей, период которой отвечает половине периода осцилляций Раби,  $T_R/2$ , показанных на рис. 3а, т. е. времени



**Рис. 6.** (В цвете онлайн) Зависимости от времени средних значений проекции спина  $\langle \sigma_z \rangle$  (а) и среднего значения координаты  $\langle y \rangle$  (б) для  $F = 0.05$  мэВ/нм. Амплитуда осцилляций  $\langle y \rangle$  на панели б находится в согласии с поведением  $\langle \sigma_z \rangle$  на панели а и оценкой (19). Частота быстрых осцилляций соответствует частоте поля  $\omega$ , период медленных осцилляций огибающей отвечает половине периода  $T_R/2$  осцилляций Раби, показанных на рис. 3а. в) Зависимости от времени среднеквадратичного отклонения  $\Delta y$  для амплитуд поля  $F$  [мэВ/нм] = 0.03 (1), 0.05 (2), 0.07 (3), 0.09 (4). Рост  $\Delta y$  продолжается от начального значения  $L/2$  до максимального значения, пропорционального амплитуде поля  $F$

смены заселенностей двух дискретных уровней. На рис. 6б показан график  $\langle y(t) \rangle$  для того же значения  $F = 0.05$  мэВ/нм. Видно, что осцилляции  $\langle y(t) \rangle$  следуют за осцилляциями  $\langle \sigma_z \rangle$  согласно соотношению (18). Амплитуда осцилляций  $y_0$ , согласно оценке (19), не должна превышать для наших параметров значения  $y_0 = 19$  нм, что, как видно на рис. 6б, находится в хорошем согласии с численными результатами.

Для описания динамики в координатном пространстве наряду с эволюцией среднего значения координаты целесообразно рассмотреть и поведение среднеквадратичного отклонения

$$\Delta y(t) = \sqrt{\langle y^2(t) \rangle - \langle y(t) \rangle^2},$$

определяющего характерную ширину волновой функции. На рис. 6в показана зависимость  $\Delta y(t)$  для всех четырех амплитуд поля, рассматриваемых в данной работе. Можно видеть, что  $\Delta y(t)$  показывает рост от начального значения  $L/2$ , отмеченного на графике горизонтальной чертой, до значений порядка 3000 нм, т. е. происходит расплывание начального состояния вдоль края ТИ. Максимальное значение  $\Delta y(t)$  на рис. 6в почти линейно зависит от амплитуды электрического поля  $F$ , что отражает возрастание вклада от состояний континуума в волновую функцию (13) с возрастанием амплитуды поля, которая входит линейно в нестационарный гамильтониан (11). Характерное время достижения максимума  $\Delta y(t)$  на рис. 6в можно сопоставить с пороговым временем пересечения средней энергией на рис. 5 границ интервала  $E_1 < \langle E \rangle < E_2$ , что отвечает нарастанию заметного вклада состояний континуума в полную волновую функцию.

Необходимо сделать следующие пояснения относительно результатов, представленных на рис. 6. Наличие осцилляций для  $\langle y(t) \rangle$  и для соответствующей компоненты скорости  $\langle v_y(t) \rangle$ , т. е. проекции спина  $\langle \sigma_z(t) \rangle$ , согласно выражению (18), вместо постоянного тока для краевого состояния, являющегося собственной функцией гамильтониана  $H_{1D} = Ak_y \sigma_z$  без барьеров, обусловлено двумя обстоятельствами. Во-первых, это принятое нами приближение бесконечно широких барьеров, что отвечает функционированию всей системы «квантовая точка + барьеры» в «запертом» режиме. Во-вторых, это периодическое во времени электрическое поле в гамильтониане (11), не вызывающее постоянного тока с определенной направленностью в пространстве, а приводящее лишь к осцилляциям скорости и расплыванию начального состояния, как это видно на рис. 6. При этом локальная плотность тока в какой-либо точке

вне области конфайнмента может иметь отличное от нуля среднее значение на рассматриваемом интервале времени, что будет отражать процесс покидания электроном области квантовой точки. В следующем разделе мы рассмотрим зависимость усредненной по времени локальной плотности тока в данной точке вне области конфайнмента как функции амплитуды электрического поля.

Еще одно важное замечание касается взаимоотношений между убывающей во времени суммарной вероятностью заселенности дискретных уровней (15) и растущей величиной  $\Delta y(t)$  на рис. 6в. Значительное уширение волновой функции (13) вдоль  $y$ , что выражается в возрастании  $\Delta y(t)$ , обусловлено растущим со временем вкладом состояний непрерывного спектра, которые делокализованы на всем масштабе нашей структуры, т. е. на области  $2d = 12$  мкм. Следовательно, даже небольшая примесь состояний континуума, когда величина (15) в начале эволюции на рис. 4 еще не сильно уменьшилась по сравнению с единицей, может дать заметный рост  $\Delta y(t)$  на рис. 6в. При этом максимум электронной плотности по-прежнему будет сосредоточен в области квантовой точки на тех временах  $t < \tau$ , где время ухода в континуум  $\tau \propto 1/w(F)$ , а  $w(F)$  оценивается согласно (17). Кроме того, среднее значение координаты, т. е. «центр тяжести» электронной волновой функции, как это видно на рис. 6б, все время эволюции остается в области между барьерами для рассматриваемого примера. Это также будет проиллюстрировано в следующем разделе при построении графика плотности вероятности, на котором будет видно, что основная с точки зрения вклада в норму часть волновой функции находится в начале эволюции между барьерами. В итоге на временах  $t < \tau$  даже при расплывании волновой функции, как мы полагаем, можно рассчитывать на осуществление операций с двухуровневой частью спектра, требуемых для создания кубита.

Подводя итог данного раздела, мы можем сделать вывод, что различные методы исследования динамики как в гильбертовом пространстве состояний для вероятности локализации (15) и средней энергии, так и в координатном пространстве для среднего значения и дисперсии координаты дают согласующиеся друг с другом аппроксимации. Эти аппроксимации позволяют оценить время покидания электроном зоны локализованных состояний и его последующего постепенного перехода в непрерывный спектр.

#### 4. РАСПРЕДЕЛЕНИЯ ПЛОТНОСТИ В ПРОСТРАНСТВЕ И ПЛОТНОСТЬ ТОКА ВЕРОЯТНОСТИ

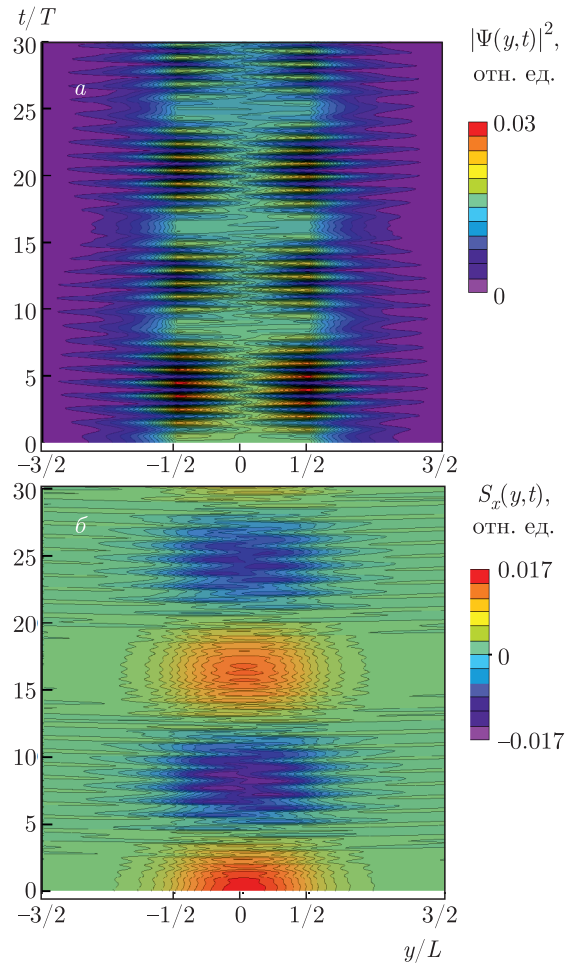
##### 4.1. Эволюция распределений плотности

Для экспериментального и практического применения обсуждаемых эффектов важное значение имеет эволюция не только средних значений, но и локальных плотностей соответствующих физических величин. Прежде всего, это плотность заряда, т. е. плотность вероятности, и плотность спиновой проекции  $S_i$  (в единицах  $\hbar/2$ ), определяемые в состоянии (13) как

$$\begin{aligned} \rho(y, t) &= |\Psi(y, t)|^2, \\ S_i(y, t) &= \Psi^\dagger(y, t)\sigma_i\Psi(y, t), \end{aligned} \quad (20)$$

где  $i = x, y, z$ . Мы рассмотрим пример эволюции плотностей (20) для плотности вероятности и компоненты спиновой плотности  $S_x$  в области, примыкающей к квантовой точке и занимающей пространственный интервал  $-3L/2 < y < 3L/2$ , для наиболее сильного электрического поля  $F = 0.09$  мЭВ/нм на начальном этапе эволюции при  $0 < t < 30T$ .

На рис. 7 приведены контурные графики вида  $f(y, t) = C$  для плотности вероятности (рис. 7а) и компоненты спиновой плотности  $S_x(y, t)$  (рис. 7б), на начальном этапе эволюции  $0 < t < 30T$ . На рис. 7 можно выделить несколько особенностей для эволюции плотности, которые качественно присутствуют и при других значениях амплитуды электрического поля  $F$ . Во-первых, наблюдаются мелкомасштабные быстрые осцилляции на частоте электрического поля  $\omega$ , подобные осцилляциям для  $\langle y(t) \rangle$ , рассмотренным в предыдущем разделе. Во-вторых, наблюдаются крупномасштабные медленные осцилляции с периодом, соответствующим смене заселенностей дискретных уровней  $E_1$  и  $E_2$  с частотой Раби. Нам представляется важной следующая особенность эволюции плотности  $S_x$ , заметная на рис. 7б: заселенность уровня  $E_1$  со знаком спиновой плотности  $S_x > 0$  сменяется на времена порядка  $T_R = 16T$  заселенностью уровня  $E_2$  с  $S_x < 0$ . Это связано с противоположными знаками проекции  $S_x$  для состояний двух дискретных уровней, как показано на рис. 2б,г. Данная особенность может иметь значение для экспериментального детектирования явления осцилляций Раби в данной системе, так как смена знака проекции спиновой плотности может быть обнаружена магнитным зондом, находящимся в непосредственной близости от квантовой точки. Наконец, третья особенность графиков на рис. 7 со-



**Рис. 7.** (В цвете онлайн) Эволюция распределений (20) для плотности вероятности (а) и компоненты спиновой плотности  $S_x$  (б) в периодическом электрическом поле с амплитудой  $F = 0.09$  мЭВ/нм, в области  $-3L/2 < y < 3L/2$  и на интервале  $0 < t < 30T$ . Мелкомасштабные осцилляции отвечают частоте электрического поля. Интервал времени, на котором происходит смена знака  $S_x$ , отвечает периоду осцилляций Раби, при котором заселенность уровня  $E_1$  с  $S_x > 0$  сменяется заселенностью уровня  $E_2$  с  $S_x < 0$ . С течением времени амплитуда обеих плотностей в области квантовой точки испытывает затухание, что связано с переходами в непрерывный спектр, сопровождающимися нарастающей делокализацией волновой функции

стоит в том, что с течением времени амплитуда обеих плотностей в области квантовой точки постепенно затухает, что на рассматриваемом на рис. 7 масштабе времени лучше заметно для спиновой плотности. Это связано с переходами в непрерывный спектр, сопровождающимися нарастающей делокализацией волновой функции. Мы обсудим интенсивность такой делокализации в следующем разделе при расчете тока вероятности.

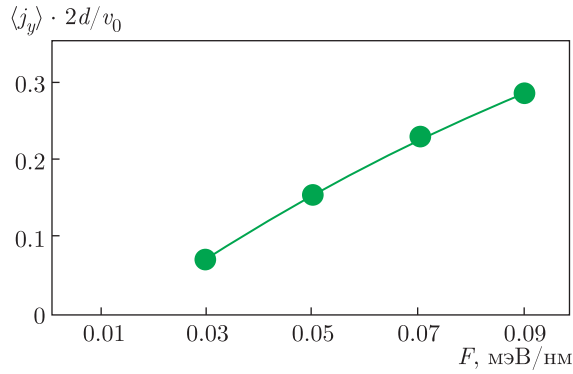


Рис. 8. Зависимость среднего значения локальной плотности тока вероятности (21) за весь период наблюдения  $0 < t < NT$  от амплитуды электрического поля  $F$

#### 4.2. Плотность тока вероятности

Для количественного описания интенсивности покидания области квантовой точки при переходах в континуум помимо эволюции заселенности дискретных уровней (15) можно рассчитать плотность тока вероятности в некоторой точке вне области конфайнмента. Даже если полный ток через структуру равен нулю, т.е. система «квантовая точка + барьеры» находится в «запертом» режиме, ненулевой средний ток в конкретной точке вне области конфайнмента служит индикатором ухода в непрерывный спектр [27, 28]. Для нахождения плотности тока обратимся к оператору скорости (18), который пропорционален оператору проекции спина  $\sigma_z$ . Мы будем вычислять значение плотности тока в выбранной точке  $y_0 = 3L/2$ , т.е. вне области квантовой точки. Далее, надо учесть то обстоятельство, что в периодическом электрическом поле локальная плотность вероятности испытывает мелкомасштабные осцилляции на периоде поля, как это видно на рис. 7а, что отразится и на мгновенных значениях плотности тока. Чтобы определить среднюю плотность тока за все время наблюдения  $0 < t < NT$ , где в наших расчетах  $N = 150$ , мы выполним усреднение локальной плотности тока по этому интервалу и после подстановки выражения (18) для оператора скорости будем вычислять величину

$$\langle j_y(y_0) \rangle = \frac{A}{\hbar} \frac{1}{NT} \int_0^{NT} \Psi^\dagger(y_0, \tau) \sigma_z \Psi(y_0, \tau) d\tau. \quad (21)$$

Результаты расчета усредненного тока (21), нормированного на скорость  $v_0 = A/\hbar$  и полную длину краевой области  $2d$ , показаны на рис. 8. Можно выделить следующие особенности полученных результатов. Во-первых, усреднение (21) дает ненулевое среднее значение плотности тока вероятности на рассматриваемом интервале времени  $0 < t < NT$ ,

что говорит о развитии процесса ухода электрона из области квантовой точки в континуум. Во-вторых, из рис. 8 можно сделать вывод, что с ростом амплитуды поля  $F$  максимальное значение плотности тока, пропорциональное локальной спиновой плотности  $S_z(y_0, t)$ , растет в зависимости от  $F$  по закону, близкому к линейному. Это находится в согласии с нашими предыдущими результатами о динамике средних значений проекций спина для локализованных состояний в подобной квантовой точке со многими дискретными уровнями, рассмотренной в работе [12]. Можно надеяться, что полученные результаты для плотности тока вероятности могут быть экспериментально проверены при детектировании электрического тока вне области квантовой точки, что будет служить индикатором перехода в состояния непрерывного спектра.

#### 5. ВЫВОДЫ

Исследована динамика электронных состояний под действием периодического электрического поля, приложенного к квантовой точке, созданной магнитными барьерами на краю топологического изолятора на базе квантовой ямы HgTe/CdTe. Рассмотрена конфигурация с двумя дискретными уровнями с противоположной  $x$ -проекцией спина и учтены состояния непрерывного спектра над барьерами. Рассчитана частота осцилляций заселенностей дискретных уровней для различных амплитуд поля, а также эволюция суммарной заселенности дискретных уровней со временем при учете состояний континуума. Исследована динамика средних значений энергии,  $z$ -проекции спина и координаты, а также локальных плотностей вероятности и  $x$ -проекции спина, и соответствующей локальной плотности тока вероятности, описывающей покидание квантовой точки. Результаты работы могут быть полезны при создании новых поколений устройств наноэлектроники и спинтроники на основе топологических изоляторов.

**Благодарности.** Авторы выражают признательность А. А. Конакову, И. С. Бурмистрову, А. Ф. Садрееву, С. В. Морозову, В. Я. Алёшкину и другим участникам XXIV Международного симпозиума «Нанофизика и наноэлектроника» (Нижний Новгород, 10–13 марта 2020 г.), а также семинара по физике полупроводников Института физики микроструктур РАН, за полезные обсуждения. Авторы благодарны Д. А. Кулакову за техническое содействие.

**Финансирование.** Работа выполнена при поддержке гранта в рамках Государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ № 0729-2020-0058 и гранта Президента РФ МК-1719.2020.2.

**ПРИЛОЖЕНИЕ А**

В данном Приложении мы обсудим вывод гамильтониана (2) для взаимодействия краевых состояний с магнитными барьерами. Будем опираться на результаты работы [11], где был получен гамильтониан взаимодействия в базисе краевых со-

стояний, т.е. двухкомпонентных спиноров, являющихся собственными функциями гамильтониана (1). В указанной работе исследовалось взаимодействие со спином магнитной примеси, которую можно рассматривать как сильнолокализованный магнитный барьер. Спиновая часть оператора обменного взаимодействия не зависит от пространственного профиля потенциала взаимодействия, если он остается достаточно короткодействующим, что имеет место и в нашей модели. Мы воспользуемся выражением (6) из Supplementary Material работы [11] для оператора взаимодействия  $H_{ex}$  с магнитной примесью (барьером):

$$H_{ex} = \begin{pmatrix} J_z S^z + J_{an} S^- + J_{an}^* S^+ & J_{\perp}^* S^- \\ J_{\perp} S^+ & -(J_z S^z + J_{an} S^- + J_{an}^* S^+) \end{pmatrix} f(y). \tag{22}$$

Здесь  $f(y)$  есть функция, описывающая пространственную локализацию магнитного барьера вдоль края, которому параллельна в нашей модели ось  $y$ . В работе [11], а также в работах [7, 8] функция  $f(y)$  была аппроксимирована дельта-функцией. В нашей модели мы предполагаем более плавный профиль намагниченности конечной ширины и высоты, аппроксимируемый ступенчатой функцией, что, по нашему мнению, лучше соответствует реальным магнитам. При этом характер взаимодействия с магнитом имеет по-прежнему обменную, т.е. локальную и короткодействующую природу. Компоненты намагниченности барьера обозначены как  $S^z$  и  $S^{\pm} = S^x \pm iS^y$ . Константы обменного взаимодействия обозначены как  $J_z$ ,  $J_{\perp} = J_{\perp}^*$  (так как согласно [11]  $J_{\perp}$  — вещественная величина), и присутствует добавка от анизотропной части обменного взаимодействия с параметром  $J_{an}$ . В работе [11] принята оценка  $|J_{an}| \ll |J_{\perp}| \ll |J_z|$ , поэтому анизотропное слагаемое в нашей модели может быть опущено, и мы положим  $J_{an} = 0$ . Далее, в нашей задаче намагниченность барьера ориентирована в плоскости  $xy$ , поэтому компонента намагниченности  $S^z = 0$ . В этих обстоятельствах гамильтониан взаимодействия (22) с магнитным барьером в базисе двухкомпонентных собственных функций гамильтониана краевых состояний (1) примет следующий вид:

$$H_{ex} = \begin{pmatrix} 0 & J_{\perp}^* S^- \\ J_{\perp} S^+ & 0 \end{pmatrix} f(y). \tag{23}$$

Принимая во внимание вещественность  $J_{\perp}$  и обозначая проекции намагниченности барьера как

$|J_{\perp}|S^x = M \cos \theta$ ,  $|J_{\perp}|S^y = M \sin \theta$ , с учетом определения  $S^{\pm} = S^x \pm iS^y$  мы получаем из (23), что

$$H_{ex} = M \begin{pmatrix} 0 & \cos \theta - i \sin \theta \\ \cos \theta + i \sin \theta & 0 \end{pmatrix} f(y), \tag{24}$$

или

$$H_{ex} = M f(y) \left( \cos \theta \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \sin \theta \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \right), \tag{25}$$

т.е. выражение

$$H_{ex} = M f(y) (\sigma_x \cos \theta + \sigma_y \sin \theta), \tag{26}$$

которое определяет взаимодействие краевых состояний с каждым из магнитных барьеров в гамильтониане (2) нашей модели.

**ПРИЛОЖЕНИЕ В**

Включение однородного в пространстве, но переменного во времени (т.е. рассматриваемого в квазистационарном приближении) электрического поля в гамильтониан может осуществляться при помощи скалярного или векторного потенциалов. В применении к краевым состояниям в ТИ и подобных им структурам используются оба подхода. Так, в нашей работе [12] использовался скалярный потенциал, в работе [29] — только векторный потенциал, а в работах [30, 31] учитывались вклады и от скалярного,

и от векторного потенциалов. В данном Приложении мы покажем, что переход от скалярного к векторному потенциалу, приводящий к появлению спинного оператора  $\sigma_z$  в гамильтониане, не изменяет матричного элемента, отвечающего за частоту Раби для переходов между двумя дискретными уровнями в нашей системе.

При использовании векторного потенциала  $\mathbf{A}(t)$  включение в гамильтониан переменного электрического поля  $\mathbf{F}(t) = -\partial\mathbf{A}/c\partial t$  осуществляется путем обычной подстановки  $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{k} - e\mathbf{A}/\hbar c$ . Для нашей задачи с гамильтонианом (2) и периодическим электрическим полем вдоль оси  $y$  с компонентой  $F \sin \omega t$  мы получаем после такой подстановки оператор возмущения  $V_1(t)$  в следующей форме, нормированной на амплитуду электрического поля  $F$ , измеряемую у нас в мЭВ/нм:

$$\frac{V_1(t)}{F} = -\frac{A}{\hbar\omega} \sigma_z \cos \omega t, \quad (27)$$

где  $A = 360$  мЭВ · нм — константа в гамильтониане (2), а частота электрического поля удовлетворяет условию резонанса (12). В такой форме возмущение от электрического поля содержит спиновый оператор  $\sigma_z$  и не содержит оператора координаты, как в калибровке со скалярным потенциалом, применявшейся в гамильтониане (11), для которой оператор возмущения  $V_2(t)$  имеет вид

$$V_2(t)/F = y \sin \omega t. \quad (28)$$

В правой части обоих операторов, (27) и (28), стоят величины, имеющие размерность координаты, поэтому матричные элементы данных операторов без временного множителя можно обозначить как

$$y_{mn}^{(1)} = y_0 \cdot (\sigma_z)_{mn}, \quad y_{mn}^{(2)} = y_{mn}. \quad (29)$$

В первом из выражений (29) амплитуда  $y_0 = A/\hbar\omega$  совпадает с амплитудой, определяемой правой частью неравенства (19), которое иллюстрирует характерный масштаб осцилляций среднего значения координаты для динамики в базисе краевых состояний. Таким образом, оба подхода как со скалярным, так и с векторным потенциалом приводят к одному и тому же набору характерных амплитуд для возмущения от электрического поля.

Количественное сопоставление двух выражений в (29) для матричных элементов между двумя дискретными уровнями  $E_1$  и  $E_2$  приводит к следующему результату. Для матричного элемента координаты во втором равенстве в (29) мы нашли численно, что  $|y_{12}^{(2)}| = 13.19$  нм. Для оценки первого

выражения в (29) нам необходимо значение  $y_0$ , равное в нашей задаче 18.71 нм, и значение матричного элемента оператора спина  $\sigma_z$ . Численные расчеты показывают, что для пары дискретных уровней при выбранных параметрах задачи  $|\sigma_z|_{12} = 0.705$ , что согласно (29) дает значение модуля матричного элемента  $|y_{12}^{(1)}| = 13.19$  нм, т.е. совпадающее с полученным из калибровки со скалярным потенциалом. Совпадение результатов подходов с операторами спина и координаты не является случайным, поскольку оператор скорости для данной модели, согласно (18), пропорционален оператору спина  $\sigma_z$ , т.е. динамика координаты и  $z$ -проекции спина тесно связаны. Мы полагаем, что найденное хорошее согласие между двумя подходами позволяет использовать при исследовании осцилляций Раби любой из них, что обосновывает применение скалярного потенциала для описания переменного во времени и однородного в пространстве электрического поля в гамильтониане (11).

## ЛИТЕРАТУРА

1. B. A. Bernevig, *Topological Insulators and Topological Superconductors*, Princeton Univ. Press, Princeton, USA (2013).
2. *Topological Insulators. Fundamentals and Perspectives*, ed. by F. Ortmann, S. Roche, and S. O. Valenzuela, Wiley-VCH Verlag, Weinheim, Germany (2015).
3. M. Z. Hasan and C. L. Kane, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 3045 (2010).
4. X.-L. Qi and S.-C. Zhang, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1057 (2011).
5. M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *Nature Phys.* **2**, 620 (2006).
6. A. Kundu, A. Zazunov, A. L. Yeyati, T. Martin, and R. Egger, *Phys. Rev. B* **83**, 125429 (2011).
7. C. Timm, *Phys. Rev. B* **86**, 155456 (2012).
8. G. Dolcetto, N. Traverso Ziani, M. Biggio et al., *Phys. Rev. B* **87**, 235423 (2013).
9. G. J. Ferreira and D. Loss, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 106802 (2013).
10. C. Ertler, M. Raith, and J. Fabian, *Phys. Rev. B* **89**, 075432 (2014).
11. L. Kimme, B. Rosenow, and A. Brataas, *Phys. Rev. B* **93**, 081301(R) (2016).
12. D. V. Khomitsky, A. A. Chubunov, and A. A. Konakov, *ЖЭТФ* **150**, 1200 (2016).



13. Д. В. Хомицкий, А. А. Чубанов, Е. А. Лаврухина, Н. Нжийа, ФТП **51**, 1557 (2017).
14. E. I. Rashba and Al. L. Efros, Phys. Rev. Lett. **91**, 126405 (2003).
15. D. V. Khomitsky, E. A. Lavrukina, and E. Ya. Sherman, Phys. Rev. B **99**, 014308 (2019).
16. D. V. Khomitsky, E. A. Lavrukina, and E. Ya. Sherman, Phys. Rev. Applied **14**, 014090 (2020).
17. B. D. Kong, Y. G. Semenov, C. M. Krowne, and K. W. Kim, Appl. Phys. Lett. **98**, 243112 (2011).
18. J. P. Zhang and J. H. Yuan, Eur. Phys. J. B **85**, 100 (2012).
19. Z.-Q. Liu, R.-Q. Wang, M.-X. Deng, and L.-B. Hu, Comm. Theor. Phys. **63**, 777 (2015).
20. B. Scharf, A. Matos-Abiague, J. E. Han et al., Phys. Rev. Lett. **117**, 166806 (2016).
21. C.-X. Liu, X.-L. Qi, H. Zhang et al., Phys. Rev. B **82**, 045122 (2010).
22. M. Brooks and G. Burkard, Phys. Rev. B **101**, 035204 (2020).
23. S. D. Ganichev and W. Prettl, *Intense Terahertz Excitation of Semiconductors*, Series on Semiconductor Science and Technology 14, Oxford Univ. Press (2006).
24. A. Singh, A. Pashkin, S. Winnerl et al., Light: Sci. and Appl. **9**, 30 (2020).
25. С. Кунин, *Вычислительная физика*, Мир, Москва (1992).
26. А. М. Сатанин, *Динамика электронов в наноструктурах*, Изд-во Нижегородского государственного университета им. Н. И. Лобачевского, Нижний Новгород (2006).
27. Н. Б. Делоне, В. П. Крайнов, *Атом в сильном световом поле*, Энергоатомиздат, Москва (1984).
28. Н. Б. Делоне, В. П. Крайнов, *Нелинейная ионизация атомов лазерным излучением*, Физматлит, Москва (2001).
29. A. Scholz, A. López, and J. Schliemann, Phys. Rev. B **88**, 045118 (2013).
30. F. Dolcini, R. C. Iotti, A. Montorsi, and F. Rossi, Phys. Rev. B **94**, 165412 (2016).
31. F. Dolcini, Phys. Rev. B **95**, 085434 (2017).