

*На правах рукописи*

**НЕСТОКЛОН Михаил Олегович**

**ЭФФЕКТЫ АТОМАРНОЙ СТРУКТУРЫ  
ИНТЕРФЕЙСОВ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ  
НАНОСИСТЕМАХ**

**Специальность:**

01.04.10 - физика полупроводников

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание ученой степени

доктора физико-математических наук

Санкт-Петербург

2017

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Физико-техническом институте им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук

Официальные оппоненты:

**Арсеев Пётр Иварович**, доктор физико-математических наук, член-корреспондент РАН, Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук, главный научный сотрудник.

**Бурдов Владимир Анатольевич**, доктор физико-математических наук, доцент, профессор Кафедры теоретической физики Физического факультета Федерального государственного автономного образовательного учреждения высшего образования «Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского».

**Вербин Сергей Юрьевич**, доктор физико-математических наук, профессор Кафедры физики твёрдого тела Физического факультета Санкт-Петербургского государственного университета.

Ведущая организация: **Институт физики полупроводников имени А. В. Ржанова СО РАН**

Защита состоится “19” октября 2017 г. в 10<sup>00</sup> часов на заседании диссертационного совета Д 002.205.02 при ФТИ им. А.Ф. Иоффе по адресу: 194021, Санкт-Петербург, ул. Политехническая, д. 26.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ФТИ им. А.Ф. Иоффе и на сайте [www.ioffe.ru](http://www.ioffe.ru)

Отзывы об автореферате в двух экземплярах, заверенные печатью, просьба высылать по вышеуказанному адресу на имя ученого секретаря диссертационного совета.

Автореферат разослан “\_” \_\_\_\_\_ 2017 г.

Ученый секретарь диссертационного совета  
доктор физико-математических наук

Л.М. Сорокин

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Наиболее актуальной областью современной физики полупроводников на данный момент является физика полупроводниковых наноструктур [1; 2]. Ограничение движения носителей заряда в одном или нескольких направлениях кардинально изменяет спектр квазичастиц за счёт размерного квантования. В результате оптические и транспортные свойства низкоразмерных систем существенно зависят от формы наноструктур и вида гетерограниц.

Возможность контролировать состав, размер и форму нанообъектов с использованием современных методов синтеза открывает возможность конструирования полупроводниковых наносистем с заданными параметрами и свойствами. Квантово-механическая инженерия является достаточно разработанной наукой, многие результаты в этой области за последние десятилетия перешли из предмета фундаментальных и прикладных исследований в область наукоёмких технологий.

При этом, несмотря на бурный прогресс, ряд обнаруженных в наносистемах явлений пока ещё не нашёл приложений в технике, и они остаются интересными для фундаментальной науки. Среди таких явлений нас будут прежде всего интересовать те, которые определяют тонкую структуру состояний в полупроводниковых наноструктурах, связанную с дополнительными внутренними степенями свободы: спином и долинным индексом носителей заряда. Они наиболее перспективны для приложений, основанных на новых фундаментальных принципах и при должном развитии могут привести к принципиально новым методам обработки информации, для которых предложены названия спинтроники [3; 4] и валлейтроники [5; 6].

Для точного контроля спиновой и долинной степеней свободы оказываются критически важны механизмы, приводящие к смешиванию электронных состояний в различных долинах и/или с противоположными спинами. Для спиновой структуры оказывается существенной, а для долинной структуры — определяющей роль гетероинтерфейсов: междолинное смешивание возможно только в меру нарушения трансляционной инвариантности, а понижение вращательной симметрии, связанное с выделенным

направлением химических связей на интерфейсах приводит к смешиванию различных спиновых состояний. Для количественного описания роли интерфейсов требуются методы расчёта электронных состояний, которые учитывают локальную конфигурацию и химический состав на атомном уровне. Таким образом, требуется расчёт в рамках атомистических методов.

Перечисленные выше проблемы определяют актуальность темы диссертации, посвящённой расчёту в методе сильной связи ряда спин-зависимых, долинных и оптических эффектов, которые определяются атомарной структурой идеальных гетероинтерфейсов.

Целью работы является теоретическое исследование эффектов атомарной структуры интерфейсов в полупроводниковых наносистемах: спинового расщепления подзон размерного квантования в квантовых ямах, долинного расщепления состояний в квантовых ямах и квантовых точках, тонкой структуры энергетического спектра акцепторных состояний в полупроводниках, в том числе с учётом микроскопических упругих деформаций.

Научная новизна и практическая значимость работы состоит в разработке метода сильной связи, который позволяет на атомном уровне рассчитывать эффекты, связанные с влиянием интерфейсов на свойства полупроводниковых наноструктур. С помощью расчётов в методе сильной связи и анализа результатов в методе эффективной массы удалось теоретически исследовать ряд фундаментальных эффектов: изучить роль интерфейсов в линейном по волновому вектору спиновом расщеплении подзон размерного квантования в квантовых ямах; изучить ряд эффектов тонкой долинной структуры в квантовых ямах и квантовых точках; показать, что свойства одиночных акцепторов существенно модифицированы локальной конфигурацией химических связей.

Основные положения выносимые на защиту:

1. Предложена оригинальная схема учёта упругих деформаций в методе сильной связи. Показано, что она позволяет не только количественно учесть на атомном уровне влияние упругих деформаций кристаллической решётки на зонную структуру полупроводниковых

наносистем, но и проследить нелинейную зависимость зонной структуры тройных твёрдых растворов системы InGaAsSb от состава.

2. Расчёт оптических переходов на гетероинтерфейсе типа II в методе сильной связи демонстрирует, в согласии с экспериментом, высокую латеральную оптическую анизотропию.
3. Интерфейсный вклад в спиновое расщепление электронных состояний в квантовых ямах полупроводников  $A^{III}B^V$  сопоставим с вкладом Дрессельхауза, а в квантовой яме CdHgTe/HgTe/CdHgTe в области топологического перехода он качественно меняет энергетический спектр носителей тока, приводя, в частности, к раздвижке дираковских конусов.
4. В гетероструктурах с решёткой цинковой обманки, выращенных в направлении [110], упругие деформации за счёт рассогласования постоянных решётки, вносят существенный вклад в квантовых ямах AlGaAs/GaAs/AlGaAs и определяющий вклад в квантовых ямах InGaAs/InAs/InGaAs в спиновое расщепление электронных подзон.
5. В наноструктурах на основе многодолинных материалов, таких как квантовые ямы SiGe/Ge/SiGe и квантовые точки PbS, PbSe и Ge/Si/SiO<sub>2</sub>, тонкая структура электронных состояний обусловлена междолинным смешиванием на интерфейсах.
6. Анизотропная часть короткодействующего потенциала оказывает заметное влияние на форму волновой функции дырки, связанной на глубоком акцепторе в полупроводниках с решёткой цинковой обманки и алмаза. В формировании изображений глубоких акцепторов, получаемых с помощью атомной туннельной микроскопии, ключевую роль играет взаимодействие состояния, связанного на нейтральном акцепторе, с поверхностью.

Апробация работы. Результаты исследований, вошедших в диссертацию, докладывались на 9-ом, 11-ом и 15-ом Международных симпозиумах “Наноструктуры: физика и технология” (С.-Петербург, 2001, 2003; Новосибирск, 2007), VII Российской конференции по физике полупроводников

(Звенигород, 2005), Международных конференциях по физике полупроводников ICPS-28, ICPS-31, ICPS-34 (Вена, Австрия, 2006; Цюрих, Швейцария, 2012; Остин, США, 2014), 9-ой Международной конференции по физике и приложениям спин-зависимых явлений в твёрдом теле (Кобе, Япония, 2016), были представлены приглашенными докладами на 5-ом Российско-французском семинаре по нанонаукам и нанотехнологиям (Москва, 2008), Международном семинаре по эмпирическим методам в дизайне и моделировании полупроводниковых наноструктур (Дублин, Ирландия, 2010), Международном симпозиуме “Кремний и фотоника” (Ренн, Франция, 2013), Международном симпозиуме-школе “Одиночные примеси” (С.-Петербург, 2014), XII Российской конференции по физике полупроводников (Звенигород, 2015), 24-ом Международном симпозиуме “Наноструктуры: физика и технология” (С.-Петербург, 2016), XXI Симпозиуме “Нанозифика и наноэлектроника” (Нижний Новгород, 2017). Результаты исследований обсуждались также на семинарах ФТИ им. А.Ф. Иоффе, Лаборатории фотоники и наноструктур (Маркуси, Франция), Технического университета Цюриха (Швейцария), университета Кобе (Япония), Санкт-Петербургского государственного университета, Института физики полупроводников им. А.В. Ржанова. Основное содержание диссертации опубликовано в 27 научных статьях и одной главе в монографии.

Структура и объём диссертации. Диссертация состоит из Введения, пяти глав, Заключение и списка литературы. Она содержит 250 страниц текста, включая 55 рисунков и 16 таблиц. Список цитируемой литературы содержит 298 наименований.

## СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во Введении обоснована актуальность темы исследований, сформулированы цель и научная новизна работы, перечислены основные положения, выносимые на защиту.

Первая глава “Атомистические методы расчёта электронных состояний (обзор)” посвящена обзору основных методов для расчёта состояний в полупроводниковых гетероструктурах. В разделе 1.1 детально разбирается

сложность квантовомеханических расчётов, сделан краткий обзор типичных методов, использующихся в квантовой химии.

В разделе 1.2 кратко описан широко применяющийся метод функционала плотности, обсуждается его вычислительная сложность и точность в применении к полупроводникам.

§1.2.1 посвящён общей формулировке метода: формулировке теоремы Хоэнберга–Кона, затем сделан краткий обзор общих свойств обменно-корреляционной энергии, представлены уравнения Кона–Шэма, которые, как правило, используются в реальных расчётах этим методом. В §1.2.2 сделан краткий обзор различных обменно-корреляционных функционалов, обсуждаются их достоинства и недостатки, область применимости, показано, что метод достаточно плохо описывает электронные состояния в полупроводниковых материалах. В §1.2.3 обсуждаются различные подходы к решению уравнений Кона–Шэма, которые приводят к различной вычислительной сложности метода. Показано, что вычислительная сложность хотя и намного лучше масштабируется, чем сложность методов квантовой химии, но по-прежнему слишком велика, чтобы использовать этот метод для расчёта реальных наноструктур.

Раздел 1.3 посвящён краткому описанию нескольких эмпирических методов: **k-p** метода, метода псевдопотенциала и метода сильной связи. Хотя расцвет таких методов пришёлся на 80-е годы XX века, они не теряют своей актуальности и сегодня из-за того, что метод функционала плотности настолько вычислительно сложен, что сохраняются фундаментальные ограничения на его использование для расчёта систем с большим числом атомов.

Во второй главе “Метод сильной связи. Проблемы и их решение” даётся детальное описание метода сильной связи, который используется в диссертации. Раздел 2.1 посвящён детальному описанию метода сильной связи: в §2.1.1 приведена классическая формулировка Слэтера и Костера, в которой матричные элементы гамильтониана сильной связи выражаются через параметры, определяющиеся только свойствами атомов, образующих химическую связь; в §2.1.2 дано описание учёта спин-орбитального взаимодействия в методе сильной связи.

§2.1.3 посвящён описанию конкретного варианта метода с расширенным базисом  $sp^3d^5s^*$ , обсуждаются его преимущества, вкратце описана процедура подбора параметров (параметризация).

В разделе 2.2 дано детальное описание схемы расчёта с подробностями работы программы: как задаётся структура для расчёта электронных свойств системы, как строится матрица гамильтониана сильной связи, какие численные методы использовались для решения задачи на собственные значения. Показано, что использование недавно предложенного [7] метода итерационного поиска собственных значений матрицы позволяет рассчитывать с помощью метода сильной связи электронные состояния в системе из десятков тысяч атомов на персональном компьютере.

Раздел 2.3 посвящён детальному описанию учёта упругих деформаций в методе сильной связи. В §2.3.1 описан атомистический метод расчёта самих упругих деформаций — метод поля валентных сил. Для поиска конфигурации, которая минимизирует энергию, использовался метод сопряжённых градиентов. Оказывается, что в методе поля валентных сил можно получить явное выражение для градиента упругой энергии системы, что кардинально упрощает поиск минимума этой энергии. Результаты проиллюстрированы оригинальными расчётами раствора InGaAsSb [A9], показано, что такая схема также неплохо работает для наноструктур на основе других полупроводников  $A^{III}B^V$  [A8] и Ge/Si [A20]. Предложен вариант описания получающегося равновесного значения положений атомов в терминах микроскопического тензора деформации — величины, аналогичной тензору деформации в классической теории упругости, но которую можно рассчитать для каждого атома по равновесной конфигурации его окружения.

§2.3.2 посвящён описанию включения рассчитанного положения атомов и микроскопической деформации в гамильтониан сильной связи. Показано, что оригинальный метод позволяет практически идеально описать зависимость зонной структуры объёмных материалов в деформированных полупроводниках от приложенных напряжений. Приведены значения параметров, использованных в работах [A8; A9; A14].

В §2.3.3 приведены результаты расчёта для короткопериодных сверх-



решёток InAs/AlSb с использованием метода, описанного в §§2.3.1-2.3.2. Показано, что метод поля валентных сил даёт положения атомов, хорошо согласующиеся с расчётами в методе функционала плотности [A8]. Расчёт в методе сильной связи для сверхрешёток InAs/AlSb показывает, что в зависимости от химического состава (InSb или AlAs) интерфейс может обладать притягивающим или отталкивающим потенциалом для дырочных состояний. При этом на интерфейсе первого типа появляются связанные дырочные состояния, которые в сверхрешётке с одинаковыми интерфейсами расщепляются на симметричное и антисимметричное состояния [A2; A8; A11].

В §2.3.4 приведены результаты расчёта зонной структуры тройных растворов системы InGaAsSb, которые отличаются большой нелинейностью ширины запрещённой зоны в зависимости от состава. Для этих растворов предложен оригинальный метод получения параметров раствора из параметров бинарных материалов: постоянная решётки твёрдого раствора считается средним арифметическим между параметрами бинарных материалов, затем с помощью теории, развитой в §2.3.2, рассчитываются параметры бинарных материалов, упруго деформированных к постоянной решётки раствора; взвешенное (пропорционально составу) среднее полученных параметров даёт параметры сильной связи тройного твёрдого раствора. Предложенный метод демонстрирует [A9] идеальное описание тройных растворов InGaAs, GaAsSb, InGaSb, InAsSb и AlGaAs. Более того, их зонная структура может быть рассчитана в методе сильной связи для достаточно большой сверхъячейки со случайным расположением атомов. В этом случае даже длина химических связей плохо подчиняется простому правилу среднего. Однако, расчёт такого “случайного” раствора хорошо согласуется [A9] с приближением виртуального кристалла, см. рис. 1.

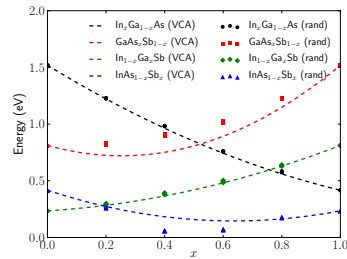


Рис. 1: Ширина запрещённой зоны случайного твёрдого раствора (символы) в зависимости от состава для сверхъячейки  $10a \times 10a \times 10a$ , сравнение с приближением виртуального кристалла (пунктирные линии).

В разделе 2.4 получены выражения для расчёта оптических свойств полупроводниковых наноструктур в рамках метода сильной связи. Вероятность оптических переходов пропорциональна матричным элементам оператора скорости, которые удобно выразить через матричные элементы гамильтониана сильной связи и оператора координаты в базисе локальных орбиталей. Для ковалентных полупроводников хорошим приближением оказывается пренебрежение внутриатомными дипольными матричными элементами оператора координаты, при этом для расчёта вероятности оптических переходов не нужны дополнительные подгоночные параметры. В § 2.4.2 приведены результаты расчёта оптических переходов на интерфейсе типа II методом сильной связи. Показано, что такие гетеропереходы могут обладать существенной латеральной оптической анизотропией за счёт пониженной симметрии интерфейса [A8; A10; A11].

В третьей главе “Спиновое расщепление подзон размерного квантования” рассматривается тонкая структура состояний в полупроводниковых наноструктурах, связанная со спин-орбитальным расщеплением.

В разделе 3.1 обсуждается микроскопическая природа спинового расщепления в структурах с квантовыми ямами на основе полупроводников с решёткой цинковой обманки и алмаза. В отсутствие центра инверсии допускаются линейные по двумерному волновому вектору спин-зависимые слагаемые в гамильтониане системы, которые приводят к спиновому расщеплению состояний. Эти слагаемые можно разделить на слагаемые, которые обусловлены отсутствием центра инверсии в объёмном полупроводнике (объёмная инверсионная асимметрия), в потенциале структуры (структурная инверсионная асимметрия) и микроскопическими свойствами интерфейсов (интерфейсная инверсионная асимметрия).

Спин-зависимые слагаемые по виду гамильтониана также можно раз-

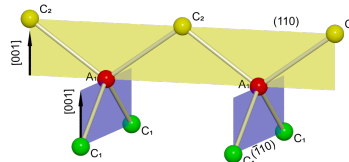


Рис. 2: Иллюстрация расположения атомов на интерфейсе полупроводников с решёткой цинковой обманки. Синим и жёлтым показаны две плоскости, в которых лежат химические связи по разные стороны интерфейса.

делить на слагаемые типа Дрессельхауза и Рашбы. В квантовых ямах, выращенных вдоль оси [001] из полупроводников с решёткой цинковой обманки симметрия допускает спин-зависимые слагаемые, линейные по волновому вектору в плоскости ямы в виде

$$\mathcal{H}_{so} = \alpha (\sigma_x k_y - \sigma_y k_x) + \beta (\sigma_x k_x - \sigma_y k_y) , \quad (1)$$

где  $\alpha$  – коэффициент Рашбы,  $\beta$  – коэффициент Дрессельхауза,  $\sigma_{x,y}$  – спиновые матрицы Паули и  $k_{x,y}$  – компоненты волнового вектора в плоскости.

В §3.1.1 в методе сильной связи рассчитано спиновое расщепление в квантовых ямах на основе гетероструктур GaAs/AlGaAs и показано [A12], что спиновое расщепление в таких ямах можно описать в рамках однозонного приближения, если добавить интерфейсные слагаемые вида

$$\begin{aligned} \hat{H}_{int} &= \sum_{v=l,r} (\hat{H}_{int,0,v} + \hat{H}_{int,1,v}) , \\ \hat{H}_{int,0,v} &= \zeta_v \delta(z - z_v) (k_x \hat{\sigma}_x - k_y \hat{\sigma}_y) , \\ \hat{H}_{int,1,v} &= \xi_v \delta'(z - z_v) (k_x \hat{\sigma}_x - k_y \hat{\sigma}_y) . \end{aligned} \quad (2)$$

В §3.1.2 показано, что в квантовых ямах на основе полупроводников с решёткой алмаза в отсутствие структурной асимметрии спиновое расщепление определяется исключительно интерфейсными слагаемыми. В результате, наличие спинового расщепления в симметричных квантовых ямах зависит от числа моноатомных слоёв в квантовой яме: для их чётного числа спиновое расщепление отсутствует, а для нечётного оно есть. Расчёт в методе сильной связи [A18; A19] позволяет установить величину этого расщепления. Оказывается, что она хорошо согласуется с оценкой снизу для спинового расщепления по экспериментальным данным по спиновой релаксации электронов в таких ямах. Это позволяет заключить, что спиновая релаксация в высокоподвижных структурах с квантовыми ямами SiGe/Si/SiGe в основном обусловлена механизмом Дьяконова-Переля за счёт спинового расщепления, обусловленного интерфейсами.

В разделе 3.2 рассмотрены квантовые ямы GaAs/AlGaAs, выращенные в кристаллографическом направлении [110]. В таких структурах спиновый

гамильтониан для электронов имеет вид

$$\mathcal{H}_{so}^{110} = \alpha_+^{110}(\sigma_{x'}k_{y'} - \sigma_{y'}k_{x'}) + \alpha_-^{110}(\sigma_{x'}k_{y'} + \sigma_{y'}k_{x'}) + \beta^{110}\sigma_{z'}k_{x'}. \quad (3)$$

В отсутствие электрического поля, приложенного к структуре, отличен от нуля только коэффициент  $\beta^{110}$ . Такой вид спинового гамильтониана приводит к существенному подавлению спиновой релаксации в механизме Дьяконова-Переля. В расчёте методом сильной связи было получено значение коэффициента  $\alpha_-^{110}$ , который определяется свойствами интерфейса. Полученная в расчёте методом сильной связи зависимость коэффициентов  $\alpha_+^{110}$ ,  $\beta^{110}$  от толщины квантовой ямы [A13] сравняется с результатами, полученными в рамках однозонного приближения.

Раздел 3.3 посвящён исследованию роли упругих деформаций в спиновом расщеплении в квантовых ямах, выращенных вдоль направления [110]. В §3.3.1 показано, что из-за того, что эффективный гамильтониан полупроводников с решёткой цинковой обманки содержит слагаемые вида [8]

$$\mathcal{H}_{str} = \frac{1}{2} (C_3 \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\varphi} + C'_3 \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\psi}), \quad (4)$$

где  $C_3$  и  $C'_3$  — материальные константы,  $\boldsymbol{\varphi}$  и  $\boldsymbol{\psi}$  — псевдовекторы, образованные из произведений компонент тензора деформации  $\boldsymbol{\varepsilon}$  и волнового вектора  $\mathbf{k}$ :

$$\boldsymbol{\varphi} = \begin{bmatrix} \varepsilon_{xy}k_y - \varepsilon_{xz}k_z \\ \varepsilon_{yz}k_z - \varepsilon_{xy}k_x \\ \varepsilon_{xz}k_x - \varepsilon_{yz}k_y \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\psi} = \begin{bmatrix} (\varepsilon_{yy} - \varepsilon_{zz})k_x \\ (\varepsilon_{zz} - \varepsilon_{xx})k_y \\ (\varepsilon_{xx} - \varepsilon_{yy})k_z \end{bmatrix}. \quad (5)$$

Деформационные константы в GaAs, полученные теоретически [9]:  $C_3 \sim 4 - 8$  эВ·Å и  $C'_3 \sim 2$  эВ·Å. Экспериментальные оценки дают  $C_3 \approx 8.1$  эВ·Å и пренебрежимо малое значение  $C'_3$  [10]. Типичные значения константы  $\beta$  в (3) лежат в пределах 7 – 15 мэВ·Å [A13]. Рассогласование постоянных решётки в квантовых ямах GaAs/AlGaAs приводит к анизотропной части тензора деформации  $\varepsilon_{x'x'} - \varepsilon_{z'z'} \sim 1 \cdot 10^{-3}$ . Вклад в спин-орбитальное смешивание, обусловленный упругими деформациями, всего в несколько раз меньше обычного слагаемого в таких AlGaAs структурах.

Более того, в квантовых ямах  $\text{In}_{0.2}\text{Ga}_{0.8}\text{As}/\text{GaAs}$ , в которых деформация  $\sim 0.02$  и константа  $C_3$  в твёрдом растворе InGaAs больше, чем в кристал-

ле GaAs, обусловленное упругими деформациями спиновое расщепление доминирует над остальными механизмами.

§3.3.2 посвящён расчёту спинового расщепления в квантовых ямах, выращенных вдоль [110], в рамках метода сильной связи с использованием оригинального подхода к учёту упругих деформаций в структуре, описанного в § 2.3.2.

В §3.3.3 представлены результаты расчёта [A14] в рамках метода сильной связи для квантовых ям GaAs/AlGaAs и InGaAs/GaAs, выполнено сравнение с оценками в методе эффективной массы. Показано, что деформационный вклад в спин-орбитальное смешивание существенно перенормирует константу Дрессельхауза в квантовых ямах GaAs/AlGaAs, которые обычно рассматриваются как недеформированные, и доминирует в спиновом расщеплении в квантовых ямах InGaAs/GaAs с существенным рассогласованием постоянных решётки.

В разделе 3.4 рассмотрена тонкая структура электронных состояний в квантовых ямах CdTe/HgTe/CdTe. При критической толщине в этих наносистемах подзона тяжёлых дырок НН1 меняется местами с подзоной электронов E1, запрещённая зона исчезает и элементарные возбуждения ведут себя как безмассовые двумерные дираковские фермионы. В ранних теоретических оценках использовалась модель, которая неявно предполагала что в структуре с квантовой ямой HgTe/CdTe есть

центр инверсии. Как следствие, симметрия состояний в подзонах E1 и НН1 разная, так что эти состояния не смешиваются и могут пересекаться. Однако, в решётке цинковой обманки центр инверсии отсутствует. Кроме того, структура с квантовой ямой имеет пониженную по сравнению с объёмом симметрию. В самом деле, каждый из интерфейсов (001) имеет точечную симметрию  $C_{2v}$ , что приводит к точечной симметрии  $D_{2d}$  для квантовой ямы. Для аналогичных квантовых ям GaAs/AlAs хорошо известно, что в группе  $D_{2d}$  состояния E1 и НН1 преобразуются по одинаковым спинор-

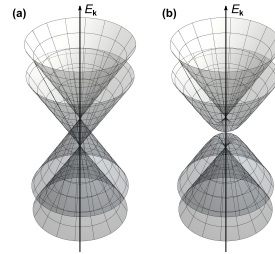


Рис. 3: Спектр энергии квантовых ям CdTe/HgTe/CdTe с (a) критической и (b) близкой к критической толщиной.

ным представлениям. Таким образом, состояния E1 и HH1 могут смешиваться, что приводит к антипересечению, а не пересечению этих уровней при нулевом волновом векторе (Г-точка).

§3.4.1 посвящён описанию процедуры расчёта. Для оценки интерфейсных эффектов использовался метод  $sp^3$ . Параметры подобраны так, чтобы воспроизводить зонную структуру объёмных кристаллов HgTe и CdTe. Энергетические расстояния между особыми точками в зоне Бриллюэна были рассчитаны методом функционала плотности в пакете программ WIEN2k. Эффективные массы определены из  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  параметров зонной структуры, которые были подогнаны под экспериментальные данные. Получены зависимость положения уровней размерного квантования от ширины квантовой ямы и вид энергетической дисперсии в зависимости от волнового вектора в плоскости.

В §3.4.2 приведено описание расщепления дираковских конусов в рамках метода плавных огибающих. Из сравнения с результатами расчёта методом сильной связи определены константы интерфейсного смешивания. Оказывается [A15], что константа, определяющая интерфейсное смешивание, неожиданно велика и равна  $2|\gamma| \simeq 10$  мэВ. Показано, что это расщепление в основном обусловлено интерфейсным антипересечением E1-HH1, которое диктуется точечной симметрией  $D_{2d}$ .

В §3.4.3 выполнено детальное моделирование спинового расщепления в квантовых ямах CdHgTe/HgTe/CdHgTe, выращенных в направлении [311]. Для расчёта использовался тот же метод сильной связи, что и в § 3.4.1, но теперь учтено влияние упругих деформаций на зонную структуру материалов. Дисперсия в плоскости оказывается более сложной. Результаты хорошо согласуются с данными о зонной структуре таких ям, полученных из эксперимента [A16]. Установлено, что метод сильной связи гораздо лучше  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  метода описывает большую разницу в величине спинового расщепления в валентной зоне и зоне проводимости.

В **четвёртой главе** “Структуры на основе многодолинных полупроводников” исследуется ряд эффектов, обусловленных сложной долинной структурой многодолинных полупроводников. Трансляционная инвариантность в наноструктурах нарушается на интерфейсах, что приводит к

смешиванию состояний из различных долин. Для описания таких эффектов требуется атомистический метод, который хорошо описывает зонную структуру полупроводников во всей зоне Бриллюэна.

В разделе 4.1 исследуется долинное расщепление в квантовых точках на основе PbSe и PbS. Они обладают рядом особенностей по сравнению с квантовыми точками из полупроводников  $A^{III}B^V$  и  $A^{II}B^{VI}$ , так как экстремумы зоны проводимости и валентной зоны в халькогенидах свинца находятся в четырёх неэквивалентных  $L$  точках зоны Бриллюэна. Для описания свойств таких нанокристаллов необходимо детально учесть обусловленное размерным квантованием долинное смешивание и анизотропию эффективной массы. В разделе рассмотрены нанокристаллы практически сферической формы, как с центром, так и без центра инверсии, и показано, что тип структуры влияет на долинное и спин-орбитальное расщепление уровней размерно квантованных носителей. В частности, в нанокристаллах без центра инверсии долинное и спин-орбитальное расщепление уровней оказывается существенно подавлено. Этот эффект необычен, так как, как правило, более высокая симметрия системы приводит к большему вырождению энергетических уровней, в то время как в данном случае подавление расщеплений возникает в нанокристаллах меньшей симметрии. Такое поведение удаётся объяснить с привлечением аппарата теории групп.

§4.1.1 посвящён деталям параметризации халькогенидов свинца в методе сильной связи. Предложена [A17] независимая параметризация в рамках  $sp^3d^5s^*$  метода сильной связи с учётом только ближайших соседей для расчёта электронной дисперсии в объёмных PbSe и PbS путём подгонки электронной дисперсии, полученной в рамках GW приближения [11].

В §4.1.2 приведены результаты расчёта электронных и дырочных состояний в методе сильной связи в нанокристаллах из PbSe и PbS. Рассмотрены точки, сформированные атомами, лежащими в пределах сферы заданного радиуса с различной микроскопической геометрией. Уровни энергии рассчитаны для нанокристаллов в зависимости от радиуса и положения центра относительно узлов кристаллической решётки, которое определяет микроскопическую симметрию квантовых точек. В расчёте получены расщепления энергии для каждого мультиплета, характеризующегося опре-

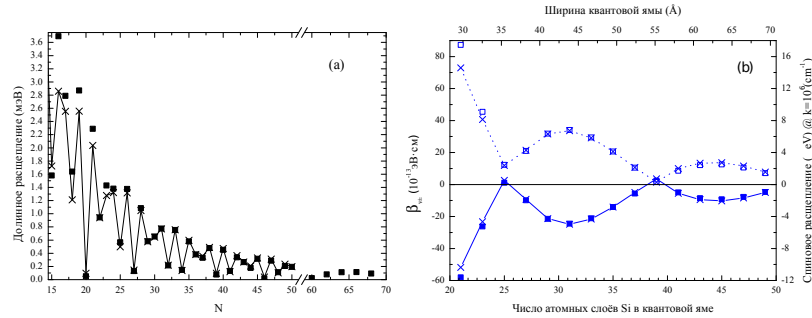


Рис. 4: (a) Долинное расщепление в зависимости от числа моноатомных слоёв  $N$  в структуре с квантовой ямой Si/SiGe без приложенного электрического поля. Квадраты и вершины ломаной линии представляют, соответственно, результаты расчёта в методе сильной связи и расчёт в приближении плавных огибающих. (b) Константы спинового расщепления в зависимости от  $N$ .

делённой чётностью. Их можно объяснить как обусловленное размерным квантованием междолинное смешивание [A17].

В §4.1.3 выполнен симметричный анализ долинных расщеплений в нанокристаллах на основе халькогенидов свинца. Качественно объяснено существенное подавление долинного расщепления в кристаллах без центра инверсии.

В разделе 4.2 рассмотрено долинное и спиновое расщепление в квантовых ямах SiGe/Si/SiGe. Как было показано в §3.1.2, в квантовых ямах Si/SiGe допускаются спин-зависимые слагаемые (1). Величина спинового расщепления в таких квантовых ямах определяется осцилляциями долинного расщепления в зависимости от толщины квантовой ямы [A18; A19].

В §4.2.1 детально описана методика расчёта долинного и спинового расщеплений в рамках метода сильной связи. В §4.2.2 приведены основные результаты расчёта: долинного расщепления в зависимости от числа моноатомных слоёв  $N$  в структуре с квантовой ямой Si и барьерами  $\text{Si}_{0.7}\text{Ge}_{0.3}$  без приложенного электрического поля. Изучено также влияние электрического поля на спиновое расщепление. В соответствии с симметричным анализом при приложении электрического поля к структуре в дополнение к спиновому расщеплению за счёт интерфейсов появляются слагаемые за счёт структурной асимметрии. Расчёт показывают, что спиновое рас-



щепление за счёт интерфейсов и структурной анизотропии оказываются сравнимы в полях порядка  $4 \cdot 10^4$  В/см.

В § 4.2.3 построен обобщённый метод плавных огибающих для описания долинного и спинового расщеплений. Оказывается, что обобщённый метод эффективной массы при оптимальном выборе параметров позволяет адекватно описывать долинное и спиновое расщепление в зависимости от толщины квантовой ямы. Аналитический подход всего лишь с пятью параметрами идеально воспроизводит сложный микроскопический расчёт, см. рис. 4.

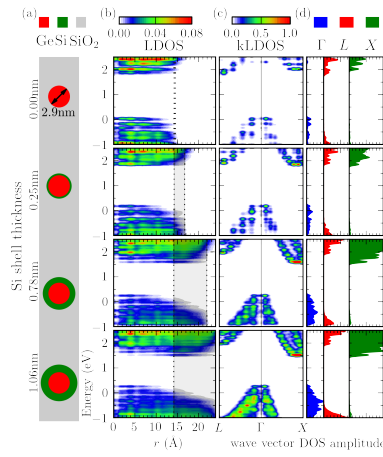


Рис. 5: (а) Нанокристаллы Ge/Si (ядро 2.9 нм, оболочка  $0 \div 1.3$  нм). Разрешённая по энергии локальная плотность состояний (b) в реальном и (c) в обратном пространстве. (d) Плотность состояний в долинах.

Энергетические уровни дырок гораздо более чувствительны к наличию оболочки, чем электронные уровни, несмотря на то, что дырки целиком локализованы в ядре. Это обусловлено сильным влиянием упругих деформаций на зонную структуру.

§4.3.1 посвящён детальному описанию процедуры расчёта в методе сильной связи. Электронный спектр получен с использованием стандартной модели сильной связи  $sp^3d^5s^*$ . Так как в литературе параметризация

В разделе 4.3 исследуется перестройка спектра состояний в квантовых точках Ge/Si ядро-оболочка при изменении толщины оболочки. Показано, что кремниевой оболочки уже монослойной толщины достаточно для уменьшения излучательной рекомбинации в результате  $L-X$  переключения [A20]. Тонкая кремниевая оболочка также приводит к сильному сдвигу фотолюминесценции в инфракрасную область. Детальный анализ структуры размерно квантованных состояний в прямом и обратном пространстве показывает, что пространственное разделение носителей не может быть достигнуто для толщин оболочки меньше 1 нм.

$\text{SiO}_2$  в методе сильной связи отсутствовала, в работе [A20] были определены параметры сильной связи, которые воспроизводит экспериментально наблюдаемые ширины и разрывы зон. Для исследования долинной структуры по результатам атомистического моделирования с использованием оригинальной методики была рассчитана локальная плотность состояний в обратном пространстве, которая позволила определить долинную структуру состояний в нанокристаллах.

В § 4.3.2 приведены результаты расчёта состояний в нанокристаллах в зависимости от размеров ядра и оболочки. Анализ локальной плотности состояний в прямом и обратном пространстве позволяет качественно проанализировать результаты атомистического расчёта, а именно, проследить пространственную и долинную структуру состояний. Также исследовано характерное время бесфононных излучательных переходов в Ge/Si нанокристаллах. Показано, что долинное переключение играет существенно большую роль в уменьшении скорости излучательных переходов, чем пространственная локализация, важная для типичных гетероструктур II рода.

В разделе 4.4 исследуются оптические свойства квантовых точек GaAs/GaP с небольшим содержанием индия в точке. В методе сильной связи выполнено атомистическое моделирование электронных и оптических свойств квантовых точек GaAs/GaP. Показано, что переходы между дырками, локализованными в точках, и электронами, сформированными из  $X_Z$  долин и локализованными в матрице GaP за счёт поля деформаций [A21; A22], играют основную роль в оптических свойствах [A23]. Расчёты подтверждаются экспериментальными данными [A24].

В §4.4.1 приведено описание структуры квантовых точек GaAs/GaP, в §4.4.2 приведены результаты расчёта состояний в методе сильной связи. Форма точки выбрана в виде усечённой вытянутой шестиугольной пира-

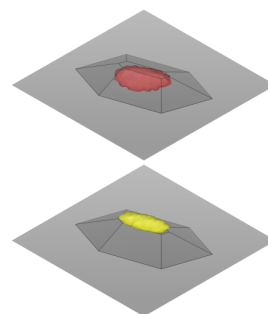


Рис. 6: Вид волновой функции основного состояния (а) дырки и (б) электрона в квантовой точке GaAs/GaP.

миды (см. рис. 6), поскольку структуры с такими точками исследовались в экспериментах. Поле деформаций рассчитано для достаточно большой сверхъячейки в поле валентных сил, электронные состояния рассчитывались в рамках  $sp^3d^5s^*$  метода сильной связи. Оказывается, что для основного состояния (2.248 эВ от потолка валентной зоны недеформированного GaP) электронная волновая функция локализована не внутри квантовой точки GaAs, а в матрице GaP близко к вершине точки. Орбитальный состав микроскопической волновой функции характерен для долины  $X_Z$ , чтобы доказать, что состояние образовано электронами из этой долины было сделано дискретное преобразование Фурье для каждой волновой функции. Фурье-образ нижнего по энергии состояния подтверждает, что оно в основном образовано из состояний долины  $X_Z$  (более 95%) с небольшой примесью состояний из  $\Gamma$  точки (0.02%).

В §4.4.3 обсуждается влияние упругих напряжений на оптические свойства квантовых точек GaAs/GaP. Сдвиг основной линии в спектрах фотолюминесценции хорошо согласуется со значениями деформационного потенциала в  $X$  долине, что подтверждает адекватность результатов микроскопического расчёта.

В разделе 4.5 рассматривается спиновая релаксация за счёт междолинных переходов в объёмном Ge. В §4.5.1 рассмотрен многодолинный  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  гамильтониан, в §4.5.2 рассмотрено электрон-фононное рассеяние и из метода инвариантов получен общий вид матрицы рассеяния электронов на фоне. В §4.5.3 рассматривается внутридолинное рассеяние: внутри долины  $\Gamma$  и внутри долины  $L$ . В §4.5.4 рассматривается междолинное рассеяние: между долинами  $\Gamma$  и  $L$  и между различными долинами  $L$ .

В пятой главе “Структура акцепторных состояний” рассматриваются проявления локальной структуры кристаллической решётки в свойствах одиночных акцепторов, которые выходят за рамки  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  метода. В  $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$  методе потенциал примеси разлагается на две части: “плавную” с нулевыми межзонными матричными элементами и “короткодействующую”, связанную с деталями потенциала вблизи примесного центра. Гамильтониан Латтинжера обладает точечной симметрией  $O_h$  и симметрия кулоновского потенциала — полная группа вращений  $O(3)$ . Однако микроскопический

потенциал примеси замещения не может находиться в центре пространственной инверсии, который в решётке алмаза должен располагаться в центре химической связи, а в решётке цинковой обманки отсутствует. В решётке цинковой обманки и алмазной решётке симметрия узла ниже:  $T_d$ . Этот факт можно не заметить, так как обе точечные группы предсказывают четырёхкратно вырожденное основное состояние дырки. Понижение симметрии в данном случае меняет пространственную структуру волновой функции, но не приводит к дополнительному расщеплению уровней энергии.

Раздел 5.1 посвящён исследованию роли короткодействующего потенциала акцепторной примеси в формировании связанных дырочных состояний на этом акцепторе. В этом разделе обсуждается, как именно модифицируется вид волновой функции основного состояния за счёт локального потенциала, деформации решётки и обменного взаимодействия.

Параграф 5.1.1 посвящён расчёту одиночной акцепторной примеси в матрице GaAs. Для того, чтобы проследить, как дырочное состояние модифицируется от мелкого к глубокому примесному состоянию и пренебречь деталями химической структуры примеси замещения, в работе [A26] был предложен упрощённый подход: к точному атомистическому гамильтониану объёмного GaAs добавлен потенциал:

$$U(r) = \frac{e^2}{\epsilon r} + U_{cc} \exp\left(-\frac{r^2}{a_{cc}^2}\right), \quad (6)$$

где  $r$  — расстояние до примесного центра,  $e$  — заряд электрона,  $\epsilon$  — диэлектрическая константа объёмного полупроводника, для анализа состояний используется фиксированный характерный радиус потенциала  $a_{cc} = 2.5\text{\AA}$ . В зависимости от амплитуды потенциала  $U_{cc}$ , можно проследить модификацию волновой функции дырки связанной на акцепторе от почти сферически симметричного кулоновского центра до глубокого центра, который обладает ярко выраженной симметрией  $T_d$ , см. рис. 7. Для количественной оценки формы основного дырочного состояния предложен метод разложения локальной плотности состояний по сферическим гармоникам.

В §5.1.2 с помощью разложения по сферическим гармоникам исследовано влияние упругих деформаций на форму волновой функции дырки, ло-

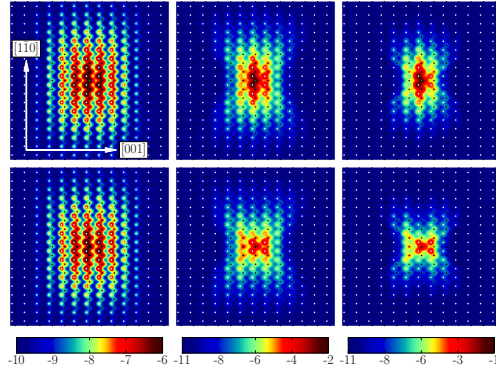


Рис. 7: Поперечный срез в плоскости (110) локальной плотности состояний примесного состояния в логарифмическом масштабе. Слева направо: кулоновский центр с энергией связи 26.9 мэВ, акцептор 89.7 мэВ и 215.4 мэВ. Положения атомов показаны чёрными (Ga) и белыми (As) точками. Верхний ряд: в плоскости примеси; нижний ряд: четвёртый атомный слой над примесью.

кализованной на акцепторе. Рассмотрены случаи деформации вдоль [001] и [110]. Показано, что разложение по сферическим гармоникам позволяет оценить изменение формы за счёт таких искажений решётки. На рис. 8 представлены результаты расчёта разложения по сферическим гармоникам состояний дырки, связанной на акцепторе в кристалле GaAs, подверженной одноосной деформации вдоль [001]. Четырёхкратно вырожденный уровень основного состояния дырки при таком возмущении расщепляется на два, которым можно качественно сопоставить состояния лёгкой и тяжёлой дырки, причём состояние тяжёлой дырки оказывается несколько “сплюснутым” вдоль направления приложения деформации. Однако, форма локальной плотности состояний оказывается существенно искажена не только кубической симметрией, появляющейся из-за гофрировки валентных зон, но демонстрирует заметную примесь компоненты, которая определяется локальной симметрией кристаллической решётки вблизи узла примеси замещения.

В §5.1.3 рассмотрен случай магнитного акцептора: рассматривается более сложная ситуация возмущения обменным взаимодействием с  $d$ -электронами. Классический пример — состояния дырки, локализованной

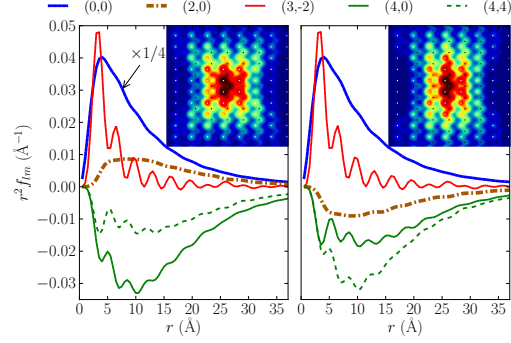


Рис. 8: Сравнение основных компонент разложения по сферическим гармоникам  $r^2 f_{lm}(r)$  для двух уровней, полученных из основного состояния расщеплением слабыми упругими деформациями вдоль оси  $[001]$ . Левая панель: уровень с энергией 88.6 мэВ ( $P_{20}/P_{00} = 0.109$ ); Правая: 91.1 мэВ ( $P_{20}/P_{00} = -0.115$ )

на примеси Mn в GaAs. Гамильтониан задачи даётся выражением

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{ex} \quad (7)$$

где  $\mathcal{H}_0$  — сумма кинетической энергии дырки и потенциала примеси и  $\mathcal{H}_{ex}$  — гамильтониан, описывающий обменное взаимодействие между состоянием дырки и электронами в  $d$ -оболочке марганца. Сначала одночастичная задача с гамильтонианом  $\mathcal{H}_0$  решается точно в приближении сильной связи и затем полный двухчастичный гамильтониан задачи  $\mathcal{H}$  диагонализуются в базисе функций, образующих основное одночастичное состояние.

Показано, что без обменного взаимодействия сферически симметричный четырёхкратно вырожденный уровень расщеплён упругими деформациями на два уровня с противоположной “плюснутостью”, которым можно сопоставить состояния тяжёлой и лёгкой дырки. Обменное взаимодействие, замешивая эти состояния в трёхкратно вырожденное состояние с полным угловым моментом 1, делает основное состояние существенно более изотропным. При этом получающаяся форма состояний практически линейно зависит от приложенных упругих напряжений.

В разделе 5.2 рассматривается расчёт в методе сильной связи изображений одиночных акцепторов Mn в матрице GaAs, полученных мето-

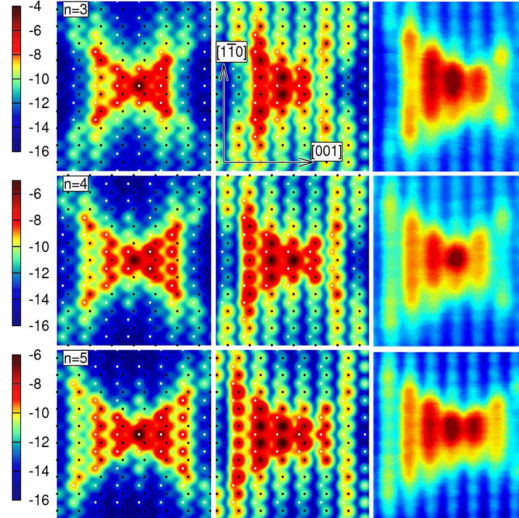


Рис. 9: Локальная плотность состояний на примеси в объёме (левая колонка), локальная плотность акцепторного состояния с учётом поверхности (центральная колонка) и результат эксперимента сканирующей туннельной микроскопии для нейтрального акцептора Mn (правая колонка). Примесь находится в  $n$  монослоях ( $n = 3, 4, 5$ ) под поверхностью  $(\bar{1}10)$ . Положения атомов показаны белыми (As) и чёрными (Ga) точками.

дом сканирующей туннельной микроскопии. В работе [A27] показано, что изображения получаются за счёт гибридизации собственных поверхностных состояний и состояния примеси. Результаты качественно поясняются в простой модели теории возмущений, которая показывает, что нет прямого количественного соотношения между изображениями сканирующей туннельной микроскопии и объёмной волновой функцией. Расчёты методом сильной связи в рамках  $sp^3d^5s^*$  модели, которые включают в себя моделирование поверхности  $(110)$  с учётом наличия на ней поверхностных состояний, экспоненциально затухающих в вакуум, хорошо воспроизводят экспериментальные данные.

В §5.2.1 приведены основные экспериментальные данные по туннельной микроскопии, в §5.2.2 приведено детальное описание результатов расчёта в рамках  $sp^3d^5s^*$  метода сильной связи. Особенностью расчёта является явный учёт поверхности. В работе [A27] предложено описание вакуума как

кристалла с решёткой цинковой обманки и параметрами, воспроизводящими дисперсию свободного электрона, что позволило описать поверхностные состояния. В расчёте учитывалось также изменение положения поверхностных атомов, выражающееся в реконструкции, которая подавляет формирование поверхностных состояний в запрещённой зоне. Зонная структура и локальная плотность состояний на (110) поверхности GaAs находятся в хорошем согласии с расчётами из первых принципов для первого незаполненного состояния  $S_3$ . Показано, что изображения сканирующей туннельной микроскопии приповерхностной примеси формируются гибридизацией примеси и собственных поверхностных состояний. Эти особенности являются общими и их можно распространить на другие типы приповерхностных локализованных состояний, таких как изображения мелких примесей и квантовых точек. Результаты расчётов в методе сильной связи с учётом поверхности находятся в согласии с экспериментом [A27]. Анализ показывает, что примесные состояния выступают в качестве зонда для поверхностных состояний.

В разделе 5.3 представлен расчёт туннельной анизотропии магнетосопротивления для модельной системы, близкой к экспериментально реализуемой туннельной гетероструктуре с одиночной примесью. Для этой системы сделана оценка [A28] магнетосопротивления в рамках расширенного метода сильной связи  $sp^3d^5s^*$  [12] с учётом обменного взаимодействия в полуклассическом подходе. В дополнение к сильной зависимости вероятности туннелирования от угла между направлением спина Mn и направлением оси роста [001], расчёты предсказывают неожиданно большую анизотропию в плоскости, образованной осями [110] и  $[\bar{1}10]$ . Такая анизотропия характерна для собственной  $C_{2v}$  симметрии гетероинтерфейса [001]. В §5.3.1 представлено детальное описание схемы расчёты и в §5.3.2 приведены основные результаты.

Результаты расчётов показывают, что зависимость вероятности туннелирования дырки с магнитной примеси через барьер от угла  $\theta$  направления спина относительно плоскости интерфейса с барьером согласуется с качественным анализом: волновая функция дырки, локализованной на акцепторе, имеет несколько “сплюснутую” форму и привязана к направ-



лению спина Mn. Когда спин ориентирован в направлении оси роста, волновая функция дырки быстрее всего затухает в направлении барьера. Это приводит к уменьшению вероятности туннелирования на ~20%. Деформация волновой функции из-за близости барьера и большая кубическая анизотропия из-за гофрировки валентной зоны практически не меняют этот качественный анализ. Изменение туннельного тока при изменении направления спина в плоскости имеет более сложную природу. Оно демонстрирует явную симметрию  $C_{2v}$  с ярко выраженной разницей между направлениями  $[\bar{1}10]$  и  $[110]$ . Рассчитанная анизотропия в плоскости, которая достигает 14%, определяется сочетанием трёх факторов, понижающих симметрию волновой функции связанного состояния: а) Собственная анизотропия объёмной волновой функции, которая определяется зависимостью вида волновой функции от направления магнитного поля относительно тетраэдрического окружения примеси, которая детально обсуждается в разделе 5.1. б) Асимметрия между левой и правой частью волновой функции обусловленная близостью барьера. в) Собственная симметрия  $C_{2v}$  интерфейса с барьером [13]. Эти вклады взаимно влияют друг на друга и вряд ли их можно уверенно разделить в конечном результате.

В **Заключении** обобщены основные результаты работы:

1. Разработана схема учёта в методе сильной связи  $sp^3d^5s^*$  микроскопических деформаций в полупроводниковых наноструктурах. Метод позволяет описать электронные состояния в сверхрешётках InAs/AlSb, тройных твёрдых растворах  $A^{III}B^V$ , квантовых ямах AlGaAs/GaAs/AlGaAs и InGaAs/InAs/InGaAs, квантовых точках GaAs/GaP, и состояния, связанные на одиночных примесях в деформированном GaAs.

2. В методе сильной связи рассчитано расщепление дираковских состояний в квантовых ямах CdTe/HgTe/CdTe критической и близкой к критической толщин. Показано, что в структурах критической толщины расщепление между конусами имеет величину порядка 10 мэВ и в основном определяется смешиванием состояний лёгкой и тяжёлой дырок на интерфейсах.

3. Показано, что долинные расщепление основного электронного и дырочного уровней в нанокристаллах PbSe и PbS очень чувствительно к распо-

ложению атомов в нанокристалле и сильно подавлено для нанокристаллов без центра инверсии.

4. Рассчитано долинное и спиновое расщепление электронных подзон в квантовых ямах SiGe/Si/SiGe в зависимости от толщины ямы и приложенного электрического поля. Показано, что величина спинового расщепления определяется величиной долинного расщепления, которое в свою очередь осциллирует в зависимости от толщины квантовой ямы.

5. Выполнено теоретическое исследование нанокристаллов ядро-оболочка из Ge/Se в широкозонной матрице. Показано, что кремниевая оболочка даже монослойной толщины существенно подавляет излучательную рекомбинацию в результате перехода (в обратном пространстве) основного электронного состояния из  $L$  в  $X$  долину. Детальный анализ структуры размерно квантованных состояний в прямом и обратном пространстве показывает, что пространственное разделение носителей несущественно для толщин оболочки, меньших 1 нм.

6. Выявлена сложная зонная структура пирамидальных квантовых точек GaAs в матрице GaP. Показано что фотолюминесценция при комнатной температуре определяется рекомбинацией электронов из  $X_Z$  долины, локализованных вблизи вершины квантовой точки, и дырок, локализованных внутри квантовой точки. Расчёты подтверждаются экспериментальными исследованиями фотолюминесценции в зависимости от приложенного гидростатического давления.

7. Изучено снятие вырождения состояний нейтральных акцепторов в GaAs упругими напряжениями и тонкая структура магнитной примеси, обусловленная обменным взаимодействием дырки с d-оболочкой примеси, её зависимость от приложенных напряжений. Показано, что изображения приповерхностных атомов Mn в GaAs, полученные методом сканирующей туннельной спектроскопии, формируются за счёт гибридизации примесного состояния и собственных поверхностных состояний. Важным оказывается также расщепление акцепторного уровня полем упругих напряжений вблизи поверхности.

8. Предсказана существенная магнитная анизотропия туннельной прозрачности барьера AlGaAs с одиночными примесями Mn. Туннельная про-

зрачность зависит от направления намагниченности  $M_n$  как относительно нормали к плоскости гетероперехода, так и от направления в этой плоскости.

## Список публикаций по теме диссертации

- [A1] Theory and Modelling for the Nanoscale: The *spds*\* Tight Binding Approach / R. Benchamekh, M. Nestoklon, J.-M. Jancu, P. Voisin // Semiconductor Modeling Techniques. Vol. 159 / ed. by X. Marie, N. Balkan. — Springer, 2012. — Chap. 2. Pp. 19–39. — (Springer Series in Materials Science).
- [A2] Nestoklon M. O. Hole states localized at type II heterointerface // International Journal of Nanoscience. — 2003. — Vol. 2. — P. 411.
- [A3]  $\Gamma - X$  electron level crossover in ZnSe/BeTe multiple quantum wells / A. A. Toropov, O. V. Nekrutkina, M. O. Nestoklon, et al. // Phys. Rev. B. — 2003. — Vol. 67. — P. 113307.
- [A4] Tensile strained nanostructures GaAs/Ga(As)Sb / A. A. Toropov, O. G. Lyublinskaya, B. Y. Meltser, V. A. Solov'ev, A. A. Sitnikova, M. O. Nestoklon, et al. // Phys. Rev. B. — 2004. — Vol. 70. — P. 205314.
- [A5] Tight-binding calculations of image-charge effects in colloidal nanoscale platelets of CdSe / R. Benchamekh, N. A. Gippius, J. Even, M. O. Nestoklon, et al. // Phys. Rev. B. — 2014. — Vol. 89, issue 3. — P. 035307.
- [A6] Герт А. В., Нестоклон М. О., Ясиевич И. Н. Зонная структура силицена в приближении сильной связи // ЖЭТФ. — 2015. — Т. 148. — С. 133–139.
- [A7] Герт А. В., Нестоклон М. О., Ясиевич И. Н. Эффективный гамильтониан силицена в присутствии электрического и магнитного полей // ЖЭТФ. — 2016. — Т. 150. — С. 976.
- [A8] Intrinsic interface states in InAs–AlSb heterostructures / F. Raouafi, R. Benchamekh, M. O. Nestoklon, et al. // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2016. — Vol. 28, no. 4. — P. 045001.
- [A9] Nestoklon M. O., Benchamekh R., Voisin P. Virtual crystal description of III–V semiconductor alloys in the tight binding approach // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2016. — Vol. 28, no. 30. — P. 305801.

- [A10] *Ивченко Е. Л., Нестоклон М. О.* Оптические переходы на полупроводниковом интерфейсе типа II в эмпирической теории сильной связи // ЖЭТФ. — 2002. — Т. 121. — С. 747.
- [A11] *Ivchenko E. L., Nestoklon M. O.* Lateral optical anisotropy of type-II interfaces in the tight-binding approach // Phys. Rev. B. — 2004. — Vol. 70. — P. 235332.
- [A12] *Alekseev P. S., Nestoklon M. O.* Effective one-band approach for the spin splittings in quantum wells // Phys. Rev. B. — 2017. — Vol. 95, issue 12. — P. 125303.
- [A13] Spin splitting of electron states in (110) quantum wells: Symmetry analysis and k-p theory versus microscopic calculations / M. O. Nestoklon, S. A. Tarasenko, J.-M. Jancu, P. Voisin // Phys. Rev. B. — 2012. — Vol. 85, issue 20. — P. 205307.
- [A14] Spin splitting of electron states in lattice-mismatched (110)-oriented quantum wells / M. O. Nestoklon, S. A. Tarasenko, R. Benchamekh, P. Voisin // Phys. Rev. B. — 2016. — Vol. 94, issue 11. — P. 115310.
- [A15] Split Dirac cones in HgTe/CdTe quantum wells due to symmetry-enforced level anticrossing at interfaces / S. A. Tarasenko, M. V. Durnev, M. O. Nestoklon, et al. // Phys. Rev. B. — 2015. — Vol. 91, issue 8. — P. 081302.
- [A16] Spin-orbit splitting of valence and conduction bands in HgTe quantum wells near the Dirac point / G. M. Minkov, A. V. Germanenko, O. E. Rut, A. A. Sherstobitov, M. O. Nestoklon, et al. // Phys. Rev. B. — 2016. — Vol. 93, issue 15. — P. 155304.
- [A17] *Poddubny A. N., Nestoklon M. O., Goupalov S. V.* Anomalous suppression of valley splittings in lead salt nanocrystals // Phys. Rev. B. — 2012. — Vol. 86, issue 3. — P. 035324.
- [A18] *Nestoklon M. O., Golub L. E., Ivchenko E. L.* Spin and valley-orbit splittings in SiGe/Si heterostructures // Phys. Rev. B. — 2006. — Vol. 73, issue 23. — P. 235334.
- [A19] Electric field effect on electron spin splitting in SiGe/Si quantum wells / M. O. Nestoklon, E. L. Ivchenko, J.-M. Jancu, P. Voisin // Phys. Rev. B. — 2008. — Vol. 77. — P. 155328.
- [A20] Tuning Optical Properties of Ge Nanocrystals by Si Shell / M. O. Nestoklon, A. N. Poddubny, P. Voisin, K. Dohnalova // The Journal of Physical Chemistry C. — 2016. — Vol. 120, no. 33. — Pp. 18901–18908.

- [A21] Electronic, optical, and structural properties of (In,Ga)As/GaP quantum dots / C. Robert, C. Cornet, P. Turban, T. Nguyen Thanh, M. O. Nestoklon, et al. // *Phys. Rev. B.* — 2012. — Vol. 86, issue 20. — P. 205316.
- [A22] Theoretical and experimental studies of (In,Ga)As/GaP quantum dots / C. Robert, T. N. Thanh, C. Cornet, P. Turban, M. Perrin, A. Balocchi, H. Folliot, N. Bertru, L. Pedesseau, M. O. Nestoklon, et al. // *Nanoscale Res Lett.* — 2012. — Vol. 7, no. 1. — P. 643.
- [A23] Strain-induced fundamental optical transition in (In,Ga)As/GaP quantum dots / C. Robert, M. O. Nestoklon, K. Pereira da Silva, et al. // *Applied Physics Letters.* — 2014. — Vol. 104. — P. 011908.
- [A24] Electronic wave functions and optical transitions in (In,Ga)As/GaP quantum dots / C. Robert, K. Pereira Da Silva, M. O. Nestoklon, et al. // *Phys. Rev. B.* — 2016. — Vol. 94, issue 7. — P. 075445.
- [A25] Спин-зависимое внутри- и междолинное электрон-фононное рассеяние в германии / Z. Liu, M. O. Нестоклон, J. L. Cheng и др. // *Физика Твёрдого Тела.* — 2013. — Т. 55. — С. 1510.
- [A26] Fine structure and real space analysis of neutral acceptor states in GaAs / M. O. Nestoklon, O. Krebs, R. Benchamekh, P. Voisin // *Semicond. Sci. Technol.* — 2015. — Vol. 30. — P. 035019.
- [A27] STM Images of Subsurface Mn Atoms in GaAs: Evidence of Hybridization of Surface and Impurity States / J.-M. Jancu, J.-C. Girard, M. O. Nestoklon, et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2008. — Vol. 101. — P. 196801.
- [A28] Anisotropic magneto-resistance in a GaMnAs-based single impurity tunnel diode: A tight binding approach / M. O. Nestoklon, O. Krebs, H. Jaffres, et al. // *Applied Physics Letters.* — 2012. — Vol. 100. — P. 062403.

## Список цитируемой литературы

- [1] *Ivchenko E. L., Pikus G. E. Superlattices and other heterostructures: Symmetry and optical phenomena.* — 1st ed. — Springer-Verlag, 2005.
- [2] *Ivchenko E. L. Optical spectroscopy of semiconductor nanostructures.* — 1st ed. — UK: Alpha Science International, 1995.
- [3] *Spintronics: A Spin-Based Electronics Vision for the Future / S. A. Wolf, D. D. Awschalom, R. A. Buhrman, et al. // Science.* — 2001. — Vol. 294, no. 5546. — Pp. 1488–1495. — ISSN 0036-8075.

- [4] *Dyakonov M.* Introduction to spin physics in semiconductors // *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. — 2006. — Vol. 35, no. 2. — Pp. 246–250. — ISSN 1386-9477. — Proceedings of the 14th International Winterschool on New Developments in Solid State Physics -Charges and spins in nanostructures: basics and devices.
- [5] *Rycerz A., Tworzydło J., Beenakker C. W. J.* Valley filter and valley valve in graphene // *Nature Physics*. — 2007. — Vol. 3. — Pp. 172–175.
- [6] *Xiao D., Yao W., Niu Q.* Valley-Contrasting Physics in Graphene: Magnetic Moment and Topological Transport // *Phys. Rev. Lett.* — 2007. — Vol. 99, issue 23. — P. 236809.
- [7] Deflated and Restarted Symmetric Lanczos Methods for Eigenvalues and Linear Equations with Multiple Right-Hand Sides / A. M. Abdel-Rehim, R. B. Morgan, D. A. Nicely, W. Wilcox // *SIAM J. Sci. Comput.* — 2010. — Vol. 32, issue 1. — P. 129.
- [8] *Бур Г. Л., Пукис Г. Е.* Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. — Наука, Москва, 1972.
- [9] Strain-induced conduction-band spin splitting in GaAs from first-principles calculations / A. N. Chantis, M. Cardona, N. E. Christensen, et al. // *Phys. Rev. B*. — 2008. — Vol. 78, issue 7. — P. 075208.
- [10] Spin lifetimes and strain-controlled spin precession of drifting electrons in GaAs / M. Beck, C. Metzner, S. Malzer, G. H. Döhler // *Europhys. Lett.* — 2006. — Vol. 75. — P. 597.
- [11] Quasiparticle self-consistent GW calculations for PbS, PbSe, and PbTe: Band structure and pressure coefficients / A. Svane, N. E. Christensen, M. Cardona, et al. // *Phys. Rev. B*. — 2010. — Vol. 81, no. 24. — P. 245120.
- [12] Empirical *spds*\* tight-binding calculation for cubic semiconductors: General method and material parameters / J.-M. Jancu, R. Scholz, F. Beltram, F. Bassani // *Phys. Rev. B*. — 1998. — Vol. 57, no. 11. — Pp. 6493–6507.
- [13] *Ivchenko E. L., Kaminski A. Y., Rössler U.* Heavy-light hole mixing at zincblende (001) interfaces under normal incidence // *Phys. Rev. B*. — 1996. — Vol. 54, issue 8. — Pp. 5852–5859.