

POLITECHNIKA WROCŁAWSKA
Wydział Podstawowych Problemów Techniki
Instytut Fizyki

ROZPRAWA DOKTORSKA

Ekscytony i ich defazowanie w kropkach kwantowych II rodzaju

Wojciech Donderowicz

Promotor: prof. dr hab. inż. Lucjan Jacak

Wrocław 2012

Streszczenie

W pracy przedstawiono analizę zlokalizowanych wzbudzeń elektrono-dziurowych (ekscytonów) w kropkach kwantowych II rodzaju, które niezapełnione wiążą tylko jeden rodzaj nośników, odpychając nośnik o ładunku przeciwnym. Kropki takie można otrzymać m.in. poprzez ogniskowanie polem elektrycznym w cienkiej studni kwantowej bądź metodami samoorganizacji Stranskyego-Krastanova w materiale mieszanym z odpowiednio dobranym wzajemnym położeniem pasm (jak ma to miejsce np. w strukturze InP/GaAs). Struktura ekscytonów w kropkach kwantowych II rodzaju okazuje się być bardziej złożona od odpowiedniej dla kropek I rodzaju – wiążących w niezapełnionym stanie nośniki z obydwoma znakami ładunku. Ekscyton w kropkach II rodzaju powstaje w wyniku kulombowskiego przyciągania elektronu i dziury, i jego stabilność jest mniejsza niż w przypadku kropek I rodzaju, ale duża złożoność zależności od zewnętrznych czynników (rozmiarów kropki, pola magnetycznego, bocznego pola elektrycznego, intensywności wzbudzenia) pozwala oczekiwać licznych zastosowań kropek II rodzaju w układach optoelektronicznych w skali nano, także z uwagi na cechującą je korzystną, wyjątkowo wysoką elastyczność parametrów oraz różnorodność efektów i metod sterowania (szczególnie w kropkach zadanych poprzez ogniskowanie polem elektrycznym).

Specyfika wzbudzeń ekscytonowych i trionowych w kropkach II rodzaju wiąże się z dwudolinowymi potencjałami efektywnymi (Hartree) i prowadzi do możliwości istnienia stanów metastabilnych na przejścia dipolowe (optyczne) o tej samej symetrii rotacyjnej co stan podstawowy (czyli o zerowym momencie pędu). Obserwacje eksperymentalne wydają się potwierdzać istnienie odpowiednich dubletów w widmie fotoluminescencji kropek II rodzaju oraz obecność trzech do czterech pików dla silniej wzbudzonych trionowych kompleksów X^{\pm} w charakterystycznej zależności od pola magnetycznego, chociaż numeryczna analiza wykazała przeszacowanie efektu w ramach przybliżonych analitycznych ocen w modelu Hartree. Przeprowadzono także weryfikację (metodami analitycznymi i numerycznymi) podobnych zlokalizowanych wzbudzeń na zjonizowanej domieszce (donorze lub akceptorze) w wąskiej studni kwantowej – potwierdzono brak w tym przypadku występowania wielodolinowej struktury efektywnych potencjałów Hartree, co pozwala różnicować potencjały mikroskopowe kropek i innych nanostruktur (jak zjonizowane domieszki), tylko przy pomocy metod optycznych.

Zaproponowano kilka zastosowań kropek II rodzaju, m.in. do zorganizowania akcji laserowej przez nieadiabatyczne przełączanie matryc takich kropek – opracowano model odpowiedniego lasera podczerwonego. Innym proponowanym zastosowaniem jest koherentne źródło spolaryzowanych spinowo elektronów, przy wykorzystaniu matrycy kropek II rodzaju uzyskiwanych poprzez elektrostatyczne ogniskowanie w studni kwantowej za pomocą odpowiednio zaprojektowanych nanoelektrod, w materiale półmagnetycznego półprzewodnika.

Dostrzeżono możliwość wymrażania dekoherencji fazowej spinów w kropkach kwantowych, w otoczeniu magnetycznym przy obecności fal spinowych, co jest ważnym zjawiskiem odróżniającym dekoherencję spinu od dekoherencji ładunku – silnej nawet w $T = 0$ K. W pracy przedstawiono szeroką analizę obu efektów defazowania zarówno ładunków jak i spinów w odniesieniu do elektronów i ekscytonów w kropkach kwantowych, w celu określenia wielkości oraz kinetyki defazowania ładunkowych i spinowych stopni swobody wzbudzeń w nanostrukturach. Głównym celem było opisanie i oszacowanie czasów defazowania wzbudzeń w kropkach kwantowych II rodzaju, wobec możliwości ich wykorzystania dla kwantowego przetwarzania informacji (schematy kwantowego przetwarzania informacji zostały zarysowane w dodatku). Wykazano, że jakościowe efekty defazowania nie zależą od rodzaju struktury i są takie same w kropkach I i II rodzaju a także w przypadku zjonizowanych defektów. Ilościowe oceny są także słabo czułe na typ i szczegóły potencjałów lokalizacyjnych, ponieważ wyrażają się tylko poprzez rozmiary przestrzenne lokalizacji i prędkości grupowe wzbudzeń kolektywnych otoczenia. W ten sposób wykazano, że w przypadku kropek II rodzaju spotykamy się z tymi samymi trudnościami w osiągnięciu kryteriów DiVincenzo dla implementacji korekty błędów (i zbudowania skalowanego komputera kwantowego), co w przypadku kropek kwantowych I rodzaju. Ograniczenia te nie pozwalają na skuteczne wykorzystanie dla konstrukcji skalowalnych bramek w oparciu o ładunkowe stopnie swobody, konwersji ładunkowo-spinowej i także spinowych wzbudzeń w kropkach zarówno I jak i II rodzaju.

Możliwość wymrażania defazowania spinu w kropkach kwantowych stwarza jednak perspektywy rozwoju w kierunku spintronicznych rozwiązań, do których zaliczyć można zaproponowane źródło spolaryzowanych spinowo elektronów. Innych nowatorskich zastosowań spodziewać się można przez rozwinięcie bardziej złożonych nanoukładów przy udziale plazmonów w metalicznych nanocząstkach, które w warunkach rezonansowego sprzężenia z ekscytonami, szczególnie w łańcuch przestrajalnych kropkach II rodzaju, stwarzają nowe nierozpoznane jeszcze możliwości. W dodatku do rozprawy zaznaczono wstępne analizy plazmonów w nanostrukturach metalicznych, co może być przydatne dla dalszych badań w kierunku plazmonowo-ekscytonowych rozwiązań.

Abstract

The present work concerns an analysis of localized electron-hole excitations (excitons) in type-II quantum dots, i.e. when confining potential of an empty QD attracts one type of charged carriers and repulses the opposite. Such dots can be obtained (among others) by electric focusing in narrow quantum well or can be fabricated using Stransky-Krastanov self-organization techniques in mixed materials with appropriate mutual positions of band banks (as e.g. in InP/GaAs structure). Structure of excitons in type-II QDs turns out much more complicated in comparison with the similar excitations in type-I QDs, that attract both type of carriers simultaneously. Localization of an exciton in type-II QD is the effect of electron-hole Coulomb attraction, counteracting the repulsion of one particle within this pair by bare dot potential. Excitons in type-II QDs are thus much more fragile, however the huge complexity of their dependence on external factors (dot size, external magnetic and electric field, level of excitation) allows expecting of many new applications of this nanostructures in nanoscale opto-electronic systems, also due to their beneficial exceptionally high degree of parameter flexibility, variety of effects and control methods (especially in electrically defined QDs).

The specificity of exciton and trion excitations in type-II QDs is associated with double-well shapes of effective potentials (Hartree), which lead to the possible existence of metastable states against dipole (optical) transitions with the same rotational symmetry as the ground state (i.e. with zero angular momentum). Experimental observations seem to confirm the existence of the corresponding doublets in the PL spectrum of type-II QDs as well as the presence of three to four peaks in case of strongly excited trion complexes X^\pm with characteristic dependence on external magnetic field, although the numerical analysis indicates possible overestimation of the effect in the approximate analytical assessments within the Hartree model. Similar localized excitation on ionized admixture (donor or acceptor) in narrow quantum wells was also examined (both analytically and numerically) – confirming no multi-valley structure of the effective Hartree potentials in such case, which allows differentiation of microscopic potentials of quantum dots and other structures (such as ionized admixtures) only by optical methods.

Some ideas of applications of type-II QDs are proposed, such as coherent source of spin-polarized electrons and an infrared laser pumped by nonadiabatic switching of lateral electric field – both implemented in a type-II QDs matrices defined by electric field focusing via specially designed metallic electrodes beyond the narrow quantum well. The former proposal is based on some advantages of diluted magnetic semiconductor material of quantum well, and in the latter one – the parabolic confinement with equidistant spectrum is convenient (due to possible cascade effect).

Possibility of freezing the phase decoherence of spin in quantum dots in magnetic environment in the presence of spin waves was recognized, which is an important feature distinguishing the spin decoherence from charge decoherence – strong even at $T = 0$ K. The work presents a broad analysis of both charge and spin dephasing effects concerning electrons and excitons in quantum dots, in order to determine the magnitude and kinetics of dephasing charge and spin degrees of freedom of excitations in nanostructures. The main objective was to describe and estimate the dephasing time of excitations in quantum dots of type II towards the possibility of their use for quantum information processing (quantum information processing schemes are outlined in the Appendix). It was shown, that the qualitative effects of dephasing do not depend on the type of structure and are the same in both type I and II quantum dots as well as in case of ionized defects. Quantitative estimations are in general also weakly sensitive to the type and localization details of the confining potentials, being expressed only through spatial size of localization and group velocity of the environmental collective excitations. Thus, with quantum dots of type II one can expect to encounter the same difficulties in achieving the DiVincenzo criteria for implementation of error correction (and building a scalable quantum computer) as in the case of type-I QDs. These limitations do not allow for the effective application for building scalable quantum gates based on charge degrees of freedom, spin-charge conversion and spin excitations in both type I and II QDs.

However, the possibility of freezing spin dephasing in quantum dots presents some perspectives of development towards spintronic solutions, which include the proposed source of spin polarized electrons. Other innovative applications can be expected through the development of more complex nanosystems with the involvement of plasmons in metallic nanoparticles, which in the conditions of resonant coupling with excitons, especially in an easily tunable type-II QDs, may create new unrecognized yet opportunities. Supplementary, some preliminary analyses by the author of plasmons in metallic nanostructures are attached, which may be useful for further studies towards plasmon-excitonic solutions.

Autor wyraża podziękowania dla Promotora Prof. dra hab. Lucjana Jacaka za wszechstronną pomoc w czasie realizacji tej pracy.

Spis treści

Wprowadzenie	1
1 Kropki kwantowe drugiego rodzaju	7
2 Stany ekscytonowe w kropkach kwantowych II rodzaju	11
2.1 Model kropki kwantowej II rodzaju	11
2.2 Zagadnienie wielocząstkowe w przybliżeniu Hartree	13
2.3 Metoda wariacyjna Hartree w zastosowaniu do kropek kwantowych II rodzaju w ujęciu analitycznym	14
2.3.1 Ekscytonowe kompleksy X^\pm w silniej wzbudzanych krop- kach kwantowych II rodzaju	18
2.4 Stany ekscytonowe w potencjale zjonizowanej domieszki i odróż- nianie potencjałów wiążących nanostruktur metodami optycznymi	24
3 Badanie stanów ekscytonowych metodami numerycznymi	29
3.1 Zagadnienie jednocząstkowe w postaci bezwymiarowej we współ- rzędnych cylindrycznych	30
3.2 Metoda numeryczna	31
3.2.1 Dyskretyzacja zagadnienia jednocząstkowego i sprowadza- nie hamiltonianu do postaci symetrycznej macierzy trój- diagonalnej	31
3.2.2 Wyznaczanie wartości i wektorów własnych	34
3.2.3 Obliczanie całki Hartree	34
3.2.4 Implementacja algorytmów obliczeniowych	36
3.3 Wyniki obliczeń numerycznych dla kropek kwantowych II rodzaju	36
3.4 Uwagi odnośnie podejścia numerycznego	43
4 Przykłady wykorzystania kropek kwantowych II rodzaju	45
4.1 Nowe możliwości realizacji urządzeń optoelektronicznych	45
4.2 Efekt Aharonowa-Bohma w kropkach kwantowych II rodzaju	47

4.3	Kropki II rodzaju w bocznym polu elektrycznym	48
5	Dekoherencja fazowa orbitalnych stopni swobody w nanostrukturach	53
5.1	Fononowe defazowanie zlokalizowanego ekscytynu w kropce kwantowej	57
5.2	Uzasadnienie uniwersalnej metody oszacowania czasu defazowania zlokalizowanych wzbudzeń	70
5.3	Silny wzrost oddziaływania ładunkowych stopni swobody z fononami LO	74
5.4	Czasowe ograniczenie spinowej blokady Pauliego przez defazowanie fononowe	77
6	Defazowanie spinowych stopni swobody w kropkach kwantowych w otoczeniu magnetycznym	81
6.1	Fale spinowe w półprzewodniku półmagnetycznym	85
6.1.1	Metoda uśredniania po losowych rozkładach domieszek	88
6.1.2	Diagonalizacja efektywnego spinowego hamiltonianu dla DMS	89
6.2	Dekoherencja spinu ekscytynu w kropce kwantowej otoczonej materiałem DMS	91
6.3	Mikroskopowy opis defazowania spinu w kropce kwantowej w magnetycznym otoczeniu	95
6.3.1	Ubieranie ekscytynu w kropce w magnony z DMS — hamiltonian s-d	97
6.3.2	Operator masowy w najniższym przybliżeniu dla wielokąt-nych wierzchołków	100
6.3.3	Urojona część operatora masowego	100
6.3.4	Różnica pomiędzy defazowaniem ekscytynu w kropce kwantowej przez magnony i fonony	102
7	Oszacowanie czasu defazowania ekscytynu w kropkach II rodzaju	105
7.1	Znajdowanie formfaktorów i funkcji korelacyjnych	106
7.2	Rezultaty dla kropek II rodzaju	108
	Podsumowanie i wnioski	115
	Bibliografia	123
A	Uwagi o informatyce kwantowej	137
A.1	Ograniczenia klasycznej informatyki	137
A.2	Porównanie informacji klasycznej i kwantowej	141
A.3	Informacja kwantowa i jej opis	146
A.3.1	Pomiar klasyczny i kwantowy	146

A.3.2	Pomiar w mechanice kwantowej	147
A.3.3	Równanie Schrödingera – ewolucja unitarna	148
A.3.4	Macierz gęstości — stan informatyczny układu (qubit)	149
A.3.5	Nierówności Bella	154
A.3.6	Reprezentacja Schmidta i stany splątane	155
A.3.7	Liczba Schmidta	156
A.3.8	Pomiar w sensie von Neumanna – superwybór Żurka	157
A.3.9	Geometryczne własności macierzy gęstości — informacji kwantowej	162
A.3.10	Stany Bella	165
A.3.11	No-Cloning, No-Broadcasting, No-Deleting dla informacji kwantowej	165
A.3.12	Oscylacje Rabiego	166
A.4	Protokoły kwantowe	168
A.4.1	Supergęste kodowanie kwantowe	168
A.4.2	Teleportacja kwantowa	169
A.5	Algorytmy kwantowe	171
A.6	Ograniczenia kwantowego przetwarzania informacji	172
A.6.1	Stopień zaawansowania technik informatyki kwantowej	174
A.6.2	Kryteria DiVincenzo	176
B	Kody źródłowe wykorzystanych procedur numerycznych	177
B.1	Znajdowanie stanów kwantowych ekscytonu	178
B.2	Znajdowanie formfaktorów oddziaływania z fononami i funkcji ko- relacyjnej	188
	Lista publikacji autora	193
	Kopie publikacji autora	195

Wprowadzenie

Kropki kwantowe [1, 2, 3] to nanometrowych rozmiarów struktury półprzewodnikowe ograniczające dynamikę nośników (elektronów, dziur, ekscytonów) we wszystkich trzech wymiarach, nazywane także z tego powodu często układami zerowymiarowymi¹. Przestrzenne ograniczenie dynamiki nośników powoduje kwantowanie energii kinetycznej, która skalując się odwrotnie proporcjonalnie do kwadratu rozmiaru ograniczenia przestrzennego d , spełnia nierówność:

$$\Delta E_k \geq \frac{(\Delta p)^2}{2m^*} \simeq \frac{\hbar^2}{2m^*d^2}. \quad (1)$$

W przypadku kropek kwantowych, dla których typowo $d \sim 5 - 50$ nm, energia kwantowania lokuje się w zakresie kilku do kilkudziesięciu meV, a zatem w obszarze łatwo dostępnym dla sterowania zewnętrznymi polami (elektrycznym i magnetycznym). Dla zwykłych atomów, z ograniczeniem dynamiki w zakresie $d \sim 0.5$ nm, energia kwantowania lokuje się na skali eV i co za tym idzie, w przypadku atomów sterowanie stanami kwantowymi przy pomocy zewnętrznych pól wymagałoby stosowania bardzo wysokich natężeń pola elektrycznego lub magnetycznego. Wyraźna przewaga kropek kwantowych, z punktu widzenia możliwości sterowania w dostępnym technicznie zakresie, jest główną zaletą tych układów kwantowych. Można dodać, że energia kulombowska skaluje się jak $1/d$ (i jest też rzędu meV dla kropek kwantowych), natomiast kinetyczną jak $1/d^2$, stąd wynikają inne własności powłokowe kropek niż zwykłych atomów, gdyż obie energie są do siebie w stosunku d , co faworyzuje energię kulombowską w przypadku kropek, w przeciwieństwie do atomów [1].

Kropki kwantowe wytwarzać można różnymi technikami, co prowadzi do różnorodności ich szczegółowych własności i rodzajów. Ze względu na sposób wiązania nośników rozróżnia się kropki pierwszego (I) oraz drugiego (II) rodzaju. Kropki pierwszego rodzaju wiążą równocześnie i elektrony i dziury z otoczenia półprzewodnikowego, podczas gdy kropki drugiego rodzaju wiążą tylko jeden ro-

¹ograniczenie dynamiki nośników do nanometrowych rozmiarów w jednym wymiarze prowadziło do tzw. studni kwantowych, a w dwóch wymiarach, do drutów kwantowych.

dziej nośników (elektrony albo dziury) równocześnie odpychając nośniki przeciwnego znaku (stąd nazywane są czasem kropkami dla elektronów i anty-kropkami dla dziur, lub odwrotnie).

Techniki wytwarzania kropek, zwłaszcza kropek drugiego rodzaju, przy pomocy ogniskowania elektrostatycznego (za pomocą odpowiednich elektrod przyłożonych do dwuwymiarowego lub jednowymiarowego gazu elektronowego w studni lub drucie kwantowym) [4, 5, 6, 7, 8], umożliwiają dużą elastyczność parametrów, a także pozwalają na tworzenie, usuwanie bądź modyfikowanie kropek przy pomocy pól zewnętrznych w czasie rzeczywistym, w trakcie działania urządzenia kwantowego, w skład którego mogą wchodzić [1, 9, 10, 11], co wiąże się z dużymi perspektywami ich zastosowania w rozwiązaniach nanotechnologicznych i spintronicznych.

Kropki kwantowe wytwarzane w strukturach półprzewodnikowych, lokowane np. w studniach lub drutach kwantowych, są obecnie rutynowo uzyskiwane w wielu laboratoriach technologii półprzewodnikowych ze względu na dobrze rozwinięte techniki manipulacji w skali nano, opanowane w zakresie wytrawiania chemicznego [12, 13], po uprzednim litograficznym naświetlaniu wzoru wiązką jonową lub elektronową o dostatecznie wysokiej rozdzielczości², lub stosowania technik samoorganizacji warstw krystalicznych [14, 15]. Technika samoorganizacji wykorzystuje metodę Stranskyego-Krastanowa, polegającą na nakładaniu warstw epitaksjalnych o różnych stałych sieciowych (za pomocą epitaksji z wiązek molekularnych [MBE, *Molecular Beam Epitaxy*] bądź z oparów związków metaloorganicznych [MOCVD, *Metal Organic Chemical Vapor Deposition*]), co prowadzi w wyniku naprężeń do samorzutnego powstawania nanokryształów na tzw. warstwie zwilżającej. Metody wytwarzania kropek kwantowych, także przy pomocy ogniskowania elektrycznego w studni kwantowej [4, 5, 6, 7, 8] opisane są szerzej m.in. w opracowaniach [1, 10].

Z kropkami kwantowymi wiązać można określenia tzw. urządzeń jednoelektronowych i jednofotonowych, co odpowiada lokalizacji w kropce pojedynczych elektronów, dziur lub ekscytonów, i kontrolowanemu ich oddziaływaniu z pojedynczymi fotonami. Stwarza to szerokie perspektywy zastosowania w nowych generacjach ultraczułych urządzeń optoelektronicznych, a także dla ewentualnego kwantowego przetwarzania informacji. We wszystkich takich zastosowaniach istotna jest możliwość sterowania stanami kwantowymi nośników w kropkach, czyli koherentnej (deterministycznej, kontrolowalnej) ich ewolucji w czasie. Koniecznym warunkiem takiej koherentnej (unitarnej) ewolucji jest brak dekoherencji, czyli niekontrolowanego zaburzenia kwantowej ewolucji przez otoczenie. Dekoherencja jest nieusuwalna, ponieważ otoczenie zawsze w jakiś stopniu oddziałuje na wyodrębniony układ – w tym wypadku na kropkę kwantową. Istotnym zadaniem jest tu zatem raczej minimalizacja dekoherencji w przedziałach czasowych

²zwykła optyczna litografia o rozdzielczości do 200-300 nm nie jest tutaj wystarczająca.

realizacji sterowania kwantowym stanem zlokalizowanym w kropce kwantowej.

Jak wynika z obszernych już przeprowadzonych badań eksperymentalnych i teoretycznych w odniesieniu do kropek kwantowych, w przypadku nanostruktur ciała stałego, w tym kropek kwantowych, pojawia się zupełnie nowa klasa zjawisk fizycznych w zakresie dekoherencji i relaksacji, odmienna w stosunku do analogicznych procesów mających miejsce w układach litych (*bulk*) lub w przypadku pojedynczych atomów. Odmienną ta, charakterystyczną dla nanostruktur, wynika ze skali energetycznej kwantowania w przypadku nanometrowej lokalizacji, zbliżonej do typowych energetycznych charakterystyk wzbudzeń kolektywnych kryształu otaczającego kropki kwantowe (dotyczy to szerokości energetycznej pasm fononowych, wielkości szczelin w tych pasmach). Wobec takiej koincydencji energetycznej, w przypadku kropek kwantowych mamy do czynienia z warunkami rezonansowymi. Jest to zupełnie inna sytuacja niż w skali atomowej, gdzie energia wiązania w atomach jest 3 rzędy wielkości większa od energii wzbudzeń kolektywnych kryształu i stąd wpływ np. fononów na stany atomowe jest niewielki, co najwyżej perturbacyjny. Także w materiale litym wzajemne relacje energetyczne nośników i wzbudzeń kolektywnych nie wykazują rezonansowych związków, zwłaszcza przy silnie różnych skalach odpowiednich charakterystyk pasmowych.

W przypadku kropek kwantowych, specyficzne efekty dekoherencyjne wynikają w dużym stopniu z rezonansowego sprzężenia uwieczonych w kropkach nośników z morzem wzbudzeń kolektywnych – fononami lub magnonami rozmaitych typów. Taka sytuacja wyraźnie odróżnia kropki kwantowe od zwykłych atomów, mimo że używane są określenia sztucznych atomów i sztucznych molekuł w odniesieniu do kropek i ich układów. Mimo ograniczeń analogii między kropkami i atomami zauważyć należy, że w kropkach wiązać można dowolne w zasadzie ilości nośników, podczas gdy w atomach liczba elektronów jest mocno ograniczona przez niestabilność jądra atomowego, co prowadzi do nieosiągalnych w atomowej fizyce sytuacji przy zastosowaniu sztucznych – kropkowych atomów i molekuł, a nawet bardziej złożonych struktur – kropkowych kryształów.

Wspomniane wyżej silne rezonansowe sprzężenie stanów kwantowych nośników uwieczonych w kropkach ze stanami zdelokalizowanymi w otoczeniu kropek powoduje znaczące przesunięcia zhybrydyzowanych poziomów energetycznych w kropkach i silne ich rozmycie – nie przypominają one zatem ostro zadanych poziomów atomowych, ale odpowiadają raczej strukturze rozmytych i przez to częściowo nawet przekrywających się poziomów, których szerokości wiążą się z dekoherencją. Rozpoznanie zatem szczegółowych mechanizmów dekoherencji w kropkach kwantowych jest niezbędne dla ich praktycznego zastosowania, kiedy wyidealizowany model odosobnionych sztucznych atomów nie może być wystarczający.

Wpływ informacji kwantowej w wyniku dekoherencji nośnika tej informacji

Teoretyczne rozważania z zakresu informatyki kwantowej [16, 17, 18, 19, 20, 21] pomijają zwykle podstawowy fakt towarzyszący kwantowej ewolucji, a mianowicie nieuniknioną dekoherencję. Są one wyidealizowanymi modelami ewolucji (Dodatek A) daleko odbiegającymi od rzeczywistych procesów kwantowych, których nieodzownym i najpowszechniejszym elementem jest dekoherencja. Ten rozdźwięk jest zasadniczą przyczyną trudności na jakie napotykają próby praktycznej implementacji układów kwantowego przetwarzania informacji, w tym komputera kwantowego. Z powodu właśnie dekoherencji nie udaje się, jak do tej pory, skonstruować dużego komputera kwantowego i realizacje obecne ograniczają się do jedynie kilku-qubitowych demonstracji technologii (Dodatek A)³.

Koherentna ewolucja kwantowego układu oznacza idealną dynamikę układu odosobnionego, który opisany jest przez własny hamiltonian, a unitarna dynamika określona jest równaniem Shrödingera:

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\Psi(t)\rangle . \quad (2)$$

Warunek hermitowskości hamiltonianu prowadzi do właśnie unitarności operatora ewolucji:

$$|\Psi(t)\rangle = e^{i\hat{H}t/\hbar} |\Psi(0)\rangle . \quad (3)$$

W ten sposób ewolucja unitarna odpowiada jednoznacznie określonej trajektorii w przestrzeni Hilberta, wyznaczonej przez powyższe równanie różniczkowe. Determinizm ten jest jednak przerywany w momencie wykonania pomiaru, kiedy zgodnie ze schematem von Neumanna następuje przypadkowy kolaps stanu mierzonego układu (Dodatek A).

W przypadku idealnej ewolucji unitarnej odizolowanego układu kwantowego mówimy o jej koherentnym charakterze. Zaburzenia i odstępstwa od takiej unitarnej ewolucji ujmowane są wspólną nazwą dekoherencji. Pomiar układu kwantowego realizowany według schematu von Neumanna jest jednym z przykładów dekoherencji. Podobnie wpływ otoczenia układu można rozpatrywać w kategoriach dekoherencji, ponieważ układ nie jest już wtedy odosobniony, a jego ewolucja nie jest unitarna.

W rzeczywistości nigdy nie mamy do czynienia z odizolowanymi układami kwantowymi i zawsze układ kwantowy podlega oddziaływaniu z otoczeniem. Nawet w przypadku, kiedy to oddziaływanie jest niewielkie, to jednak prowadzi ono do zaburzenia koherentnej ewolucji, czyli wywołuje dekoherencję. Jest to

³niedawno opublikowana została informacja o skonstruowaniu 128-qubitowego komputera kwantowego przez firmę D-Wave (www.dwavesys.com/en/products-services.html); choć nie wszystkie szczegóły techniczne zostały ujawnione, schemat działania opiera się na nowatorskiej koncepcji wyszukiwania stanu podstawowego (*quantum annealing*) w układzie bramek nadprzewodzących (odnośnie nowego schematu przetwarzania informacji kwantowej, [22]).

zrozumiałe, ponieważ dynamika układu zaburzanego przez otoczenie nie będzie determinowana tylko przez hamiltonian układu, ale też przez hamiltonian otoczenia sprzęgnięty z układem poprzez oddziaływanie. Zatem ewolucja układu będzie zależała też od ewolucji otoczenia, w stopniu proporcjonalnym do wielkości oddziaływania układu z otoczeniem.

Dekoherencja, jako proces niedeterministyczny (nie kontrolujemy bowiem ewolucji całego otoczenia) jest zasadniczą przyczyną utraty możliwości deterministycznego sterowania przetwarzaniem informacji kwantowej, co określić można jako niekontrolowany wpływ (nieodwracalną utratę, dyssypację) informacji kwantowej do otoczenia. Stopień dekoherencji można mierzyć oceniając entropię von Neumanna układu kwantowego (w analogii do procesów nieodwracalnych w fizyce statystycznej), lub posługując się prostszym pojęciem ufności – *fidelity*, określonym za pomocą jakby iloczynu skalarnego funkcji falowej układu w różnych momentach czasu) [18, 19, 20, 21, 23]. W przypadku układu oddziałującego z otoczeniem stan układu nie jest opisany na ogół przy pomocy funkcji falowej, ale raczej przy pomocy macierzy gęstości. Zatem ewolucja w czasie macierzy gęstości układu w najpełniejszy sposób odzwierciedla jego dekoherencję [18, 19, 21].

W związku z nieuchronną naturą dekoherencji, cała koncepcja teoretyczna kwantowego przetwarzania informacji opiera się na tzw. kwantowej korekcie błędów. Jest to procedura polegająca na lokowaniu kwantowej informacji w odpornych na dekoherencję obszarach przestrzeni Hilberta. Takie obszary pojawiają się w analogii do stanów singletowych pary qubitów (zawierających równocześnie obydwa stany bazowe qubitów i będących przez to nieczuлыми na ich zamiany [18, 23]). Stany takie wymagają jednak zwielokrotnienia układu kwantowego, co dodatkowo eksponencjalnie nasila dekoherencję [18, 23]. Zwielokrotnienie układu dla potrzeb kwantowej korekty błędów wymaga założenia, że dla praktycznej implementacji niezawodnej (z korektą błędów) bramki uniwersalnej komputera kwantowego niezbędne są operacje jedno- i dwu-qubitowe szybsze o co najmniej 6 rzędów wielkości niż charakterystyczny czas dekoherencji pojedynczego qubit. Spełnienie w praktyce tego warunku (nazywanego kryterium DiVincenzo [16, 17, 24, 25, 26] – dodatek A) okazuje się najpoważniejszym wyzwaniem informatyki kwantowej.

Jak dotąd nie znaleziono żadnego układu kwantowego (dla implementacji qubit i zorganizowania kwantowego przetwarzania informacji), który by spełnił kryterium DiVincenzo. We wszystkich badanych układach osiągnięto co najwyżej daleki od wymagań kryterium poziom trzech rzędów przewagi szybkości sterowania nad szybkością dekoherencji. Można w tym upatrywać ogólniejszej własności układów kwantowych [27, 28], wyrażającej fakt, że to samo oddziaływanie, przy pomocy którego sterować można układem kwantowym, otwiera w istocie kanał dekoherencji tego układu. Wynikać z tego może czasowy związek szybkości sterowania i dekoherencji, który w przypadku lokalnych realizacji mechaniki kwantowej

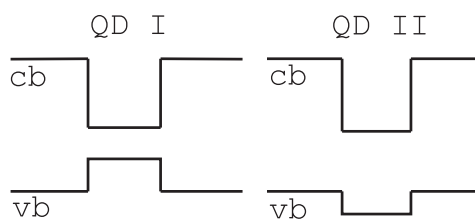
wydaże się nie przekraczać trzech rzędów wielkości. Proponowane są nielokalne rozwiązania oparte o topologiczne stopnie swobody w układach hallowskich lub wykorzystujące kolektywny stan nadprzewodnika. Lokowanie informacji kwantowej na nielokalnych stopniach swobody układu mogłoby okazać się korzystne dla zachowania koherencji ewolucji, z uwagi na lokalny charakter dekoherencji. Techniczne ograniczenia praktycznej implementacji i sterowania nielokalnych kwantowych stopni swobody stanowią jednak również silną barierę i mimo licznych wysiłków nie uzyskano jak dotąd w tym zakresie istotnego postępu.

W pracy przedstawiony zostanie przegląd dekoherencji fazowej orbitalnych (czyli ładunkowych) i spinowych (magnetycznych) stopni swobody kropek kwantowych spowodowanej przez oddziaływanie kropek z otoczeniem. Szczególną uwagę zwrócimy na własności optyczne kropek drugiego rodzaju, mniej zbadanych w porównaniu z kropkami pierwszego rodzaju. Porównane zostaną także efekty defazowania w kropkach obu rodzajów.

Rozdział 1

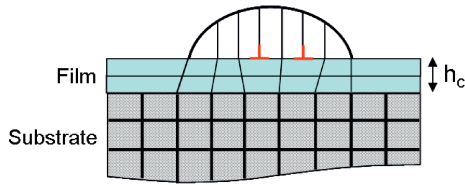
Kropki kwantowe drugiego rodzaju

Ze względu na sposób wiązania nośników kropki kwantowe podzielić można zasadniczo na dwa typy – kropki pierwszego i drugiego rodzaju. Kropki I rodzaju wiążą równocześnie nośniki obydwu znaków ładunku elektrycznego – elektrony i dziury, podczas gdy kropki II rodzaju wiążą tylko jeden typ nośnika (elektrony albo dziury) i równocześnie odpychają nośniki przeciwnego znaku ładunku. Kropki pierwszego rodzaju są bardziej popularne i dokładniej zbadane, ponieważ są stosunkowo łatwo osiągalne technologicznie poprzez zastosowanie technik samoorganizacji [14, 15, 1]. W typowych kropkach pierwszego rodzaju: GaAs/InAs, potencjał wiążący dla obu nośników – elektronów i dziur – powstaje w wyniku odpowiednio dobranej różnicy położenia energetycznego krawędzi pasma walencyjnego i przewodnictwa w materiałach GaAs i InAs (rys. 1.1 z lewej). Dzięki temu powstają trójwymiarowe studnie potencjału, wiążące jednocześnie elektrony z pasma przewodnictwa GaAs i dziury z pasma walencyjnego GaAs zlokalizowane w kropce (nanokryształ) InAs, utworzone na skutek niedopasowania sieciowego obu materiałów przy nakładaniu (technikami MBE lub MOCVD) warstw epitaksjalnych materiału InAs na GaAs. Istnieje stosunkowo prosta i technicznie dobrze opanowana metoda Strankyego-Krastanowa, pozwalająca na wytwarzanie samo-



Rys. 1.1. Układ pasma walencyjnego (vb) i pasma przewodnictwa (cb) dla kropki I i II rodzaju (w drugim przypadku wariant wiążący dla elektronu i odpychający dla dziury).

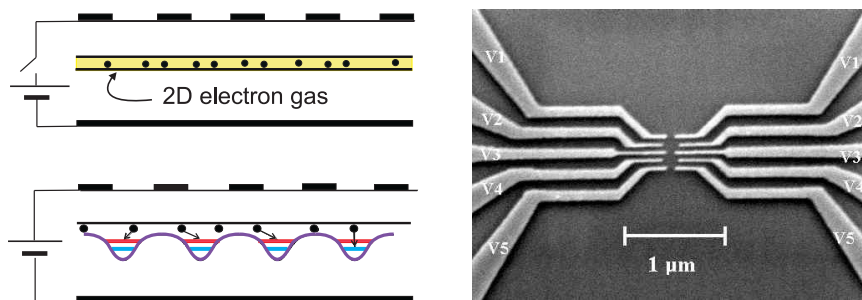
rosnących kropek pierwszego rodzaju [1, 11, 2, 3, 14, 15] (rys. 1.2). Własności optoelektroniczne takich kropek zostały szeroko przedstawione w [1] a ich dekoherencja w [27, 29, 28].



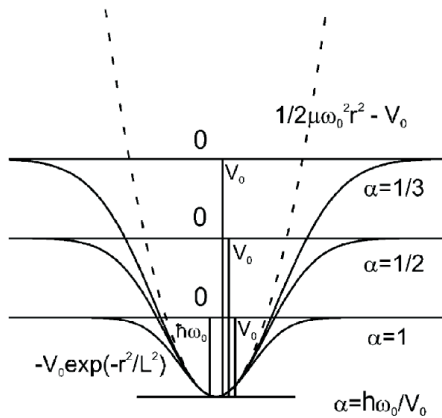
Rys. 1.2. Schematyczna ilustracja zasady powstawania kropki kwantowej w metodzie Stranskyego-Krastanowa, formującej się spontanicznie na skutek niedopasowania sieci krystalicznej warstwy epitaksjalnej i materiału podłoża.

Kropki drugiego rodzaju można wytwarzać podobnymi technikami, dobierając jednak inne materiały do warstw epitaksjalnych, w taki sposób, by krawędzie pasm wytworzyły 3-wymiarową studnię dla elektronów z pasma przewodnictwa i antystudnię dla dziur z pasma walencyjnego (rys. 1.1 z prawej), bądź odwrotnie [1]. Bardziej perspektywiczną metodą wytwarzania kropek drugiego rodzaju jest jednak ogniskowanie elektrostatyczne nośników w 2D lub 1D układach półprzewodnikowych, przez odpowiednio ukształtowane pole elektryczne pochodzące od miniaturowych nanoelektrod nałożonych na heterostrukturę studni lub drutu kwantowego [4, 5, 6, 7, 8] (rys. 1.3). Wykonanie metalowych elektrod metodami litograficznymi wykorzystującymi wiązkę elektronową lub jonową pozwala na uzyskanie wystarczającej rozdzielczości w celu odtworzenia zaprojektowanego wzoru elektrod (metodami elektrodynamiki klasycznej w zastosowaniu do kwantowej nanostruktury) [30, 31, 32]. Techniki te jednak nie są jeszcze rozpowszechnione, ani zaawansowane w dostatecznym stopniu – i dlatego kropki drugiego rodzaju są mniej popularne.

Jasne jest, że w przypadku ogniskowania elektrostatycznego potencjał wiążący dla elektronów jest dokładnym odwrotem potencjału wiążącego dla dziur. Interesujące jest konstruowanie potencjałów wiążących i antywiązących różnej głębokości lub kształtu. Podstawowym przybliżeniem potencjału wiążącego w



Rys. 1.3. Z lewej: Schemat zadawania kropek kwantowych metodą ogniskowania nośników polem elektrycznym w studni kwantowej; z prawej: przykładowy wygląd elektrody ogniskującej (źródło: Purdue University).

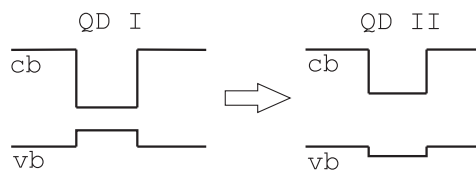


Rys. 1.4. Studnia gaussowska modelująca potencjał wiążący w kropkach kwantowych zadanych przez ogniskowanie polem elektrycznym. Poszczególne krzywe obrazują potencjały dla kropek o różnej wielkości przy założeniu stałej krzywizny gaussiana $\hbar\omega_0$ (rozmiar kropki determinowany jest wartością parametru α).

kropkach jest paraboloida – potencjał bez osobliwości w punkcie centralnym (co jest równoważne z definicją kropki kwantowej) można bowiem zawsze przybliżyć pierwszym nieznikającym członem rozwinięcia w minimum (lub w maksimum, dla antykropki), czyli członem parabolicznym. Potencjały wiążące kropek są zawsze jednak skończonej wysokości i dlatego przybliżenie gaussianem (rys. 1.4) jest tu znacznie lepszym modelem. Różnego rodzaju korekty modelowych potencjałów wiążących były przedmiotem szerokich analiz [33, 32, 34, 31, 35, 36, 37, 38]. Na potrzeby jednak badania dekoherencji stanów wzbudzeń w kropkach drugiego rodzaju model gaussowski wydaje się wystarczający, ponieważ szczegóły potencjału lokalizacyjnego nie wywierają istotnego wpływu na efekty dekoherencyjne [28].

Warto dodać, że potencjał wiążący w realnych strukturach nie jest bezpośrednio mierzalny i o jego typie można wnioskować raczej na podstawie elektrooptycznych własności kropki, choć to różnicowanie nie jest jeszcze w pełni rozpoznane i wystandaryzowane. W szczególności dla dużych kropek wytworzonych metodami wymuszonej wiązki laserowej dyfuzji [39], wydaje się, że potencjał wiążący jest drugiego rodzaju (prawdopodobnie z różną głębokością potencjału kropki i antykropki) [40, 39]. Należy też zauważyć, że teoretyczne badania wpływu naprężeń na wzajemne położenia krawędzi pasma walencyjnego w kropkach samorosnących [41, 42, 43, 44], wskazują, że kropki kwantowe nominalnie pierwszego rodzaju mogą mieć odwróconą studnię dla dziur, czyli być efektywnie drugiego rodzaju (rys. 1.5).

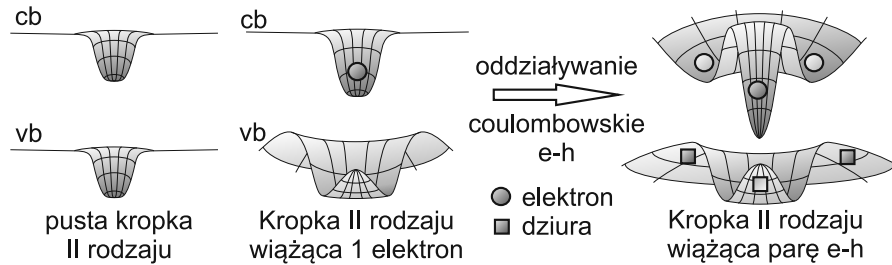
Kropki kwantowe drugiego rodzaju są bardzo perspektywiczne z punktu widzenia zastosowań. Umożliwiają bowiem ogromną elastyczność ich parametrów, a



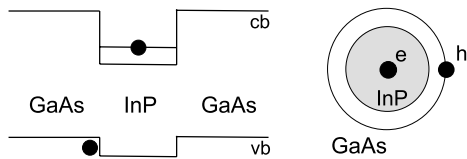
Rys. 1.5. Indukowane naprężeniami przejście właściwości studni potencjału w paśmie walencyjnym z wiążącej (dla nienapężonej sieci krystalicznej) w antywiążącą.

także – w przypadku kropek wytwarzanych ogniskowaniem elektrycznym – tworzenie, modyfikowanie lub niszczenie kropek w czasie pracy układu kwantowego, poprzez możliwe zmiany przyłożonych potencjałów elektrycznych.

Należy jednak zauważyć, że fizyka kropek drugiego rodzaju jest inna niż dla kropek pierwszego rodzaju. Kropki drugiego rodzaju nie wiążą obu nośników i lokalizacja ekscytonu w takich kropkach jest związana z subtelniejszym niż w przypadku kropek pierwszego rodzaju efektem wiązania pary poprzez oddziaływanie kulombowskie, przy równoczesnym odpychaniu jednego z nośników przez antykropkę (rys. 1.6 i 1.7). Zagadnienie to będzie szczegółowo przedstawione w tej pracy, przy wykorzystaniu analitycznych metod Hartree, a także przy użyciu technik numerycznych modelowania nanoukładów kwantowych. Poznana struktura lokalizowanych wzbudzeń w kropkach drugiego rodzaju pozwoli również na zbadanie ich defazowania w analogii do defazowania stanów zlokalizowanych w kropkach pierwszego rodzaju.



Rys. 1.6. Sposób powstawania pary elektron-dziura w kropce kwantowej II rodzaju w wyniku współdziałania gołego potencjału kropki (tu odpychający dla dziury) z przyciągającym potencjałem oddziaływania kulombowskiego między obydwojma nośnikami. Uwieszony w kropce elektron powoduje „odczuwanie” przez dziurę efektywnego potencjału wiążącego z doliną umiejscowioną okólnie wokół centrum kropki.



Rys. 1.7. Ekscyton związany na kropce kwantowej II rodzaju, z widoczną przestrzenną separacją nośników (samorosnąca kropka InP/GaAs; za [45]).

Rozdział 2

Stany ekscytonowe w kropkach kwantowych II rodzaju

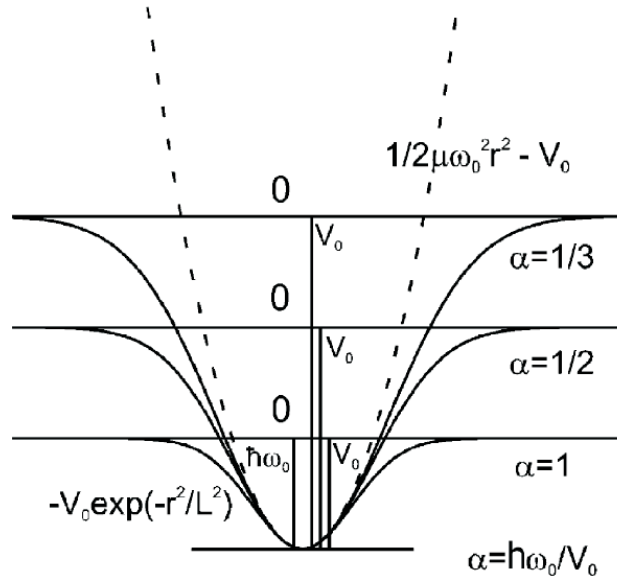
2.1 Model kropki kwantowej II rodzaju

Na potrzeby modelu zakładamy kwazidwuwymiarowy cylindryczno-symetryczny potencjał wiążący kropki kwantowej. Uproszczenie takie może być zastosowane w przypadku kropek zadanych polem elektrycznym, jak również w przypadku niektórych kropek samorosnących o soczewkowatym kształcie i niewielkich rozmiarach pionowych [1, 30].

Kształt potencjału wiążącego w płaszczyźnie $x - y$ przyjmujemy w formie dwuwymiarowej studni gaussowskiej (rys. 1.4):

$$V(\rho) = \pm V_0 e^{-\frac{\rho^2}{L^2}}. \quad (2.1)$$

która lepiej modeluje rzeczywisty kształt jam potencjałów wiążących niż prosty potencjał paraboliczny często wykorzystywany przy znajdowaniu stanów nośników w kropkach kwantowych [1, 2, 3, 30], gdyż posiada skończoną wysokość i uwzględnia możliwość opuszczania kropki przez nośniki, w dalszym ciągu pozwalając przy tym na stosowanie przybliżenia parabolicznego w pobliżu jego centrum. Takie przybliżenie w pobliżu centrum uzasadnione jest wymogiem zamkniętej od dołu studni potencjału wiążącego kropki, co odróżnia kropki kwantowe od zjonizowanych domieszek (donorów lub akceptorów) z osobliwym potencjałem wiążącym. Wyczerpująca analiza kształtu potencjału wiążącego podana została w [30], wskazując na dobrą zgodność gaussowskiego potencjału z rzeczywistym potencjałem wytwarzanym przez okrągłą elektrodę umieszczoną nad cienką studnią kwantową.



Rys. 2.1. Wyjaśnienie parametryzacji studni gaussowskiej modelującej potencjał wiążący i antywiążący kropki kwantowej.

Na potrzeby analizy możemy dodatkowo założyć stałą krzywiznę potencjału $\hbar\omega_0^1$, co umożliwia wygodne sparametryzowanie zmian rozmiaru kropki (dla zadanej krzywizny) przy użyciu bezwymiarowego parametru α (rys. 2.1). Dla kropek kwantowych II rodzaju definiowanych polem elektrostatycznym potencjał taki jest jednakowego kształtu dla dziur i elektronów i różni się tylko znakiem, w przypadku kropek II rodzaju zdefiniowanych fizyczną strukturą, obydwa potencjały, wiążący i antywiążący, mogą być w ogólności różne.

Zakładając, że mamy do czynienia z potencjałem o kształcie wiążącym dla elektronu, dziura będzie odpychana przez niezajętą kropkę. W przypadku jednak obsadzenia kropki przez elektron, dziura może być także związana przyciąganiem elektrycznym między obydwojma nośnikami. W ten sposób w kropce kwantowej II rodzaju może powstać stan związany e-h, który możemy identyfikować ze zlokalizowanym ekscytonem (por. rys. 1.6). Zbadanie takiego stanu wymaga uwzględnienia oddziaływania dwóch cząstek, elektronu z pasma przewodnictwa i dziury z pasma walencyjnego półprzewodnika, w którym ulokowana jest kropka, przy równoczesnym uwzględnieniu różnych gołych potencjałów dla obu cząstek. Zagadnienie takie można w przybliżeniu rozwiązać metodą Hartree, znajdując efektywne potencjały dla obu cząstek wynikające z wzajemnego ich oddziaływania.

¹wartość $\hbar\omega_0$ odpowiada energii stanu podstawowego oscylatora harmonicznego przy przybliżeniu gaussianu w okolicy minimum studnią paraboliczną (rozwiniecie w szereg potęgowy).

2.2 Zagadnienie wielocząstkowe w przybliżeniu Hartree

Zagadnienie stacjonarne pary elektron-dziura w kropce kwantowej w przybliżeniu masy efektywnej opisywane jest równaniem Schrödingera:

$$\hat{H}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = E\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) \quad (2.2)$$

Stosując przybliżenie Hartree pola samouzgodnionego [46, 47], dwucząstkowy hamiltonian ekscytonu można zapisać w postaci sumy hamiltonianów jednocząstkowych elektronu i dziury oraz członu odpowiadającego oddziaływaniu kulombowskiemu elektron-dziura:

$$\hat{H}(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \hat{H}_e(\mathbf{r}_e) + \hat{H}_h(\mathbf{r}_h) + V_c(|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|), \quad (2.3)$$

gdzie

$$V_c(|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|) = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon} \frac{1}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|}.$$

Funkcję falową ekscytonu możemy wtedy przyjąć w postaci iloczynu:

$$\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \psi_e(\mathbf{r}_e)\psi_e(\mathbf{r}_h), \quad (2.4)$$

gdzie efektywne jednocząstkowe funkcje spełniają równania²:

$$\left[\frac{(\hat{\mathbf{P}} - e\mathbf{A})^2}{2m_{e(h)}} + U_{e(h)}(\mathbf{r}) \right] \psi_{e(h)}(\mathbf{r}) = E_{e(h)}\psi_{e(h)}(\mathbf{r}), \quad (2.5)$$

z efektywnymi potencjałami $U_{e(h)}$:

$$\begin{aligned} U_e(\mathbf{r}_e) &= V_e(\mathbf{r}_e) - \frac{e^2}{\epsilon} \int d\mathbf{r}_h \frac{|\psi_h(\mathbf{r}_h)|^2}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|}, \\ U_h(\mathbf{r}_h) &= V_h(\mathbf{r}_h) - \frac{e^2}{\epsilon} \int d\mathbf{r}_e \frac{|\psi_e(\mathbf{r}_e)|^2}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|}. \end{aligned} \quad (2.6)$$

W powyższym przybliżeniu oddziaływanie pomiędzy dwoma cząstkami zastąpione zostało odczuwanym przez każdą z cząstek efektywnym potencjałem w postaci pola kulombowskiego wywołanego przez rozmyty ładunek drugiej cząstki. Potencjały $U_{e(h)}$ (które będziemy nazywać potencjałami Hartree) wyznacza się w sposób samouzgodniony, rozpoczynając w zerowym rzędzie od znalezienia funkcji falowej cząstki swobodnej, która następnie sukcesywnie poprawia potencjał odczuwany przez drugą cząstkę, aż do uzyskania akceptowalnie niewielkich zmian w kształcie potencjału efektywnego w kolejnych krokach.

²na potrzeby modelu dopuszczamy dodatkowo istnienie zewnętrznego pola skierowanego prostopadle do płaszczyzny kwazidwuwymiarowej kropki (w kierunku osi z), co pozwala na zbadanie wpływu jego natężenia na wiązanie nośników.

Zakładając stałe pole magnetyczne w kierunku osi z i wybierając cechowanie potencjału wektorowego:

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r} = \frac{B}{2}(-y, x, 0),$$

równanie (2.5) możemy zapisać w postaci:

$$\left(\frac{\hat{\mathbf{P}}_{e(h)}^2}{2m_{e(h)}} + U_{e(h)}(\mathbf{r}_{e(h)}) \pm \frac{1}{2}\hbar\omega_{ce(h)}l_{e(h)} \right) \psi_{e(h)}(\mathbf{r}_i) = E_{e(h)}\psi_{e(h)}(\mathbf{r}_{e(h)}), \quad (2.7)$$

gdzie $\omega_{ce(h)} = eB/m_{e(h)}$ – częstość cyklotronowa, $l = -i(x\partial_y - y\partial_x)$ – moment pędu, oraz:

$$U_{e(h)}(\mathbf{r}_{e(h)}) = \mathcal{V}_{e(h)}(\mathbf{r}_{e(h)}) - \frac{e^2}{\varepsilon} \int d\mathbf{r}_{h(e)} \frac{|\psi_{h(e)}(\mathbf{r}_{h(e)})|^2}{|\mathbf{r}_e - \mathbf{r}_h|} \quad (2.8)$$

$$\mathcal{V}_{e(h)}(r_{e(h)}) = \pm V_0 e^{-r_{e(h)}^2/L^2} + \frac{1}{8}m_{e(h)}\omega_{ce(h)}^2 r_{e(h)}^2.$$

2.3 Metoda wariacyjna Hartree w zastosowaniu do kropek kwantowych II rodzaju w ujęciu analitycznym

W podejściu analitycznym równania (2.5) rozwiązać można metodą kolejnych przybliżeń. W zerowym rzędzie przybliżenia przy braku zewnętrznego pola magnetycznego mamy dla elektronu:

$$U_e^{(0)} = -V_0 + \frac{1}{2}m_e\omega_{0e}^2 r^2, \quad (2.9)$$

gdzie związek $V_0 = \frac{1}{2}m_e\omega_{0e}^2 L^2$ (z rozwinięcia gaussianu z dokładnością do dwóch członów) definiuje krzywiznę potencjału $\hbar\omega_0$. Wprowadzamy też skalę długości, $\lambda_{0e} = \sqrt{\hbar/(m_e\omega_{0e})}$, oraz bezwymiarowy parametr charakteryzujący wielkość kropki przy stałej krzywiznie $\alpha = \frac{\hbar\omega_{0e}}{V_0}$ (im większe α tym mniejsza kropka; por. rys. 2.1).

Funkcja falowa elektronu w takim zerowym przybliżeniu ma postać:

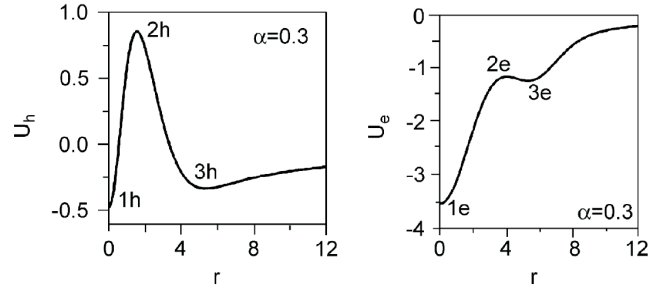
$$\psi_e^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{\pi}\lambda_{0e}} e^{-r^2/(2\lambda_{0e}^2)}, \quad (2.10)$$

a odpowiadająca jej energia wynosi $E_e^{(0)} = \hbar\omega_{0e}(1 - 1/\alpha)$. Z powyższej zależności wynika, że elektron nie jest związany jeśli $E_e^{(0)} > 0$, czyli ograniczyć musimy wielkość kropki do $\alpha \in (0, 1)$.

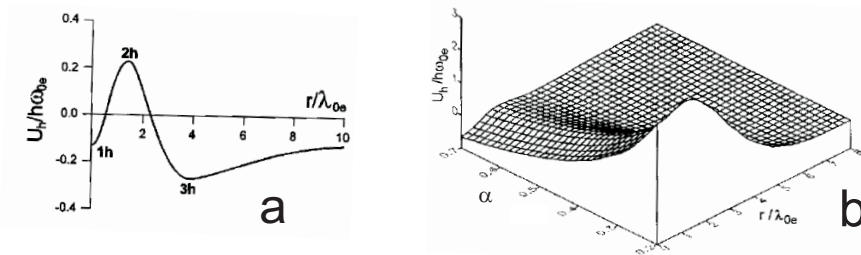
Znając stan elektronu możemy teraz łatwo wyznaczyć zerowy potencjał dla dziury:

$$U_h^{(0)} = V_h - \frac{\sqrt{\pi}e^2}{\varepsilon\lambda_{0e}} e^{-r^2/(2\lambda_{0e}^2)} I_0(r^2/(2\lambda_{0e}^2)), \quad (2.11)$$

gdzie I_0 jest funkcją Bessela zerowego rzędu. Potencjał ten ma dwa minima (co widać na rys. 2.2): w punkcie $r = 0$ i w punkcie $r = r_{3h}$. Położenie i wartości ekstremów zależą od parametru α , czyli od wielkości kropki³. Dla wartości $\alpha = 0.3$ (oraz krzywizny $\hbar\omega_0 = 5.4$ meV) przykładowy przebieg dwudolinowego potencjału Hartree dla dziury i elektronu jest przedstawiony na rys. 2.2.



Rys. 2.2. Dwudolinowa struktura potencjału Hartree dla dziury (lewy) i elektronu (prawy) w kropce kwantowej II rodzaju (kropka dla elektronu i antykropka dla dziury z gaussowskim potencjałem $\hbar\omega_0 = 5.4$ meV i dla materiału studni GaAs, przykładowy rozmiar kropki określony jest tu wartością parametru $\alpha = 0.3$).



Rys. 2.3. Dwudolinowa struktura potencjału Hartree dla dziury w kropce kwantowej II rodzaju (kropka dla elektronu i antykropka dla dziury z gaussowskim potencjałem $\hbar\omega_0 = 5.4$ meV i dla materiału studni GaAs) w zależności od rozmiaru kropki α , bez obecności pola magnetycznego (b), oznaczenia ekstremów potencjału dziury (a).

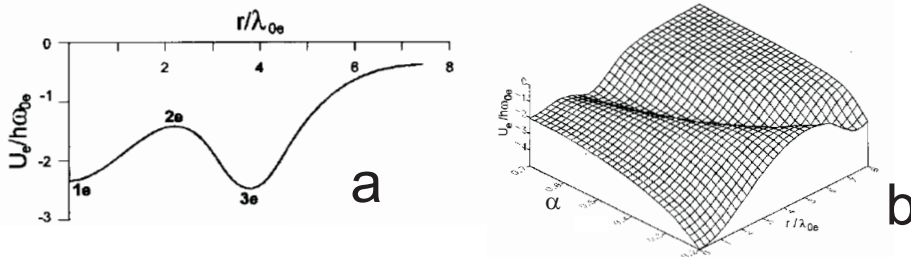
Wraz ze wzrostem α (czyli ze zmniejszaniem się kropki, przy stałej krzywiznie) drugie minimum przemieszcza się w stronę centrum (i znika w okolicy

³zależność taka jest zrozumiała wobec wiązania kulombowskiego nośników i jego konkurencji z odpychaniem antykropki

$\alpha \simeq 0.8$), rys. 2.3. Podwójna jama dla dziury (dla $\alpha < 0.8$) stwarza możliwość związania dziury w dwóch stanach będących hybrydyzacją dwóch stanów zlokalizowanych w pojedynczych jamach. Problem ten został zbadany analitycznie w pracach [1, 9] wskazując, w ramach przyjętego przybliżenia, możliwość lokalizacji dziury w centrum lub na obwodzie (w okolicach drugiego minimum), przy czym stan w centrum okazuje się niezwiązany (ma dodatnią energię) i dziura przybiera zatem kształt torusa odpowiadający lokalizacji w drugim minimum. Postać odpowiedniej funkcji falowej [9] pozwala określić kolejne przybliżenie dla efektywnego potencjału Hartree dla elektronu. W przypadku braku pola magnetycznego tylko jeden stan dziury prowadzi do potencjału o analitycznej, choć złożonej postaci:

$$\begin{aligned}
 U_e^{(1)} = \hbar\omega_{0e} & \left(-\frac{1}{\alpha} e^{-\alpha r^2/p} - \frac{e^2 \sqrt{\pi}}{\varepsilon \lambda_{0e} \hbar \omega_{0e}} \right. \\
 & \left[c_{21}^2 \sigma_1^2 e^{-\sigma_1^2 r^2/p} I_0(\sigma_1^2 r^2/p) + c_{23}^2 \sigma_3^2 e^{-\sigma_3^2 (r-r_{3h})^2/p} I_0(\sigma_3^2 (r-r_{3h})^2/p) \right. \\
 & \left. + 2c_{21}c_{23}\rho_h \sqrt{(\sigma_1^2 + \sigma_3^2)/2} e^{-(\sigma_1^2 + \sigma_3^2)(r-r_{3h}\sigma_3^2/(\sigma_1^2 + \sigma_3^2))^2/2p} I_0((\sigma_1^2 + \sigma_3^2) \right. \\
 & \left. \left. (r-r_{3h}\sigma_3^2/(\sigma_1^2 + \sigma_3^2))^2/2p) \right] \right), \quad (2.12)
 \end{aligned}$$

gdzie $\sigma_i = m_h \omega_{ih}^2 / (m_e \omega_{0e}^2)$, a ω_{ih} określają lokalne krzywizny przy ekstremach funkcji U_h^0 , $\rho_h = \int d\mathbf{r} \psi_{1h}(\mathbf{r}) \psi_{3h}(\mathbf{r})$ (całka przekrycia zlokalizowanych rozwiązań), natomiast współczynniki $c_{21(3)}$ określają hybrydyzację rozwiązań i podane są także w postaci analitycznej w [1, 9], $p = 2\lambda_{0e}^2$. Wykorzystując jawną postać potencjału Hartree w pierwszym kroku przybliżenia dla elektronu (uwzględniającego obecność złapanej dziury), pokazać można, że ten potencjał jest również dwudolinowy, co prowadzi do możliwości związania elektronu w dwóch możliwych lokalizacjach, co również szczegółowo zbadano w ramach przyjętego przybliżenia w [1, 9], rys. 2.4.



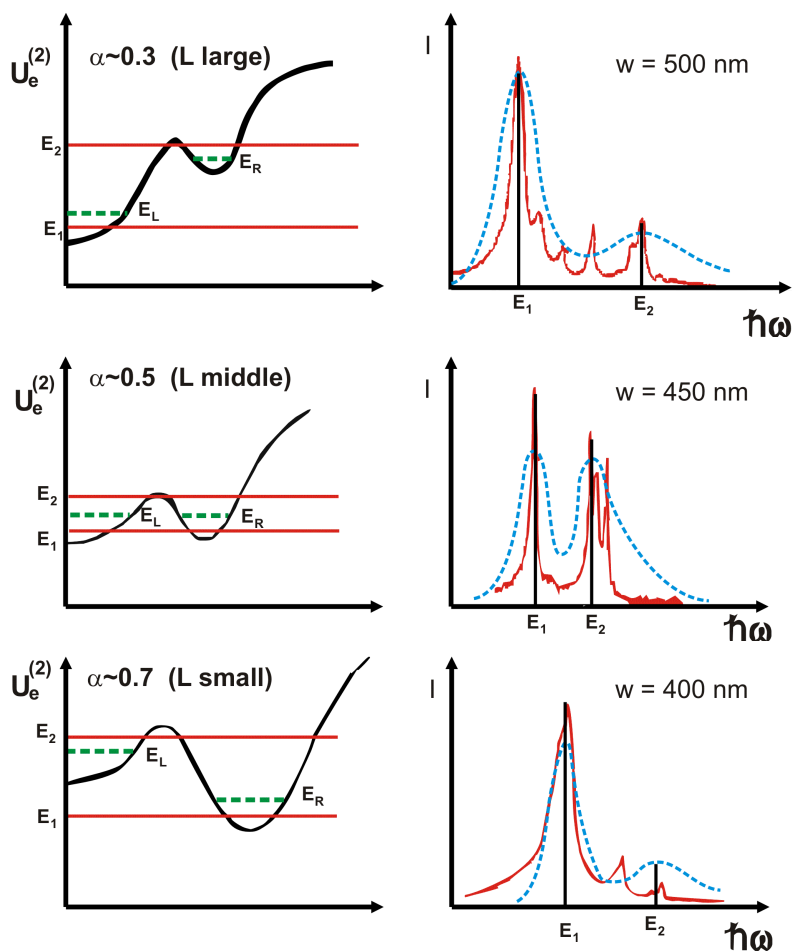
Rys. 2.4. Dwudolinowa struktura potencjału Hartree dla elektronu w kropce kwantowej II rodzaju (kropka dla elektronu i antykropka dla dziury z gaussowskim potencjałem $\hbar\omega_0 = 5.4$ meV i dla materiału studni GaAs) w zależności od rozmiaru kropki określanego wartością parametru α (b), oznaczenia lokalnych ekstremów (a).

Obydwa stany elektronu posiadają ujemną energię i w związku z tym mamy tu do czynienia z dubletem stanu ekscytonu (opisanego iloczynową funkcją Hartree) o tej samej symetrii rotacyjnej – stany te odpowiadają zerowej wartości

momentu pędu. Ten interesujący wynik wskazuje na istnienie w kropce II rodzaju dubletu ekscytonowego wzbudzenia z zabronionym dipolowym przejściem między jego elementami (z uwagi na reguły wyboru dla przejścia dipolowego między stanami o tej samej symetrii, w tym wypadku cylindrycznej z zerowym momentem pędu). Jest to istotne odróżnienie struktury ekscytonu w kropce II rodzaju od stanów ekscytonowych w kropkach I rodzaju [48], gdzie stan podstawowy nie ulega rozszczepieniu. Z istnieniem dubletu ekscytonu złożonego ze stanu podstawowego i blisko leżącego stanu metastabilnego (bez przejścia dipolowego, a zatem ze wzbronionym optycznym przejściem dipolowym) może się wiązać obserwowany w kropkach II rodzaju podwójny pik luminescencji nawet przy bardzo słabych intensywnościach wzbudzenia [40, 39] (w kropkach zdefiniowanych dyfuzyjnie po lokalnym podgrzaniu studni kwantowej silnie skolimowaną wiązką lasera) a także w kropkach samorosnących mocno naprężonych [49] (o odwróconej jamie dla dziur w stosunku do jamy dla elektronów, co zademonstrowano modelowo poprzez uwzględnienie naprężenia [43]). Równocześnie względna wielkość obu pików zależy od rozmiarów kropki, rys. 2.5 – piki są porównywalne dla średnich rozmiarów kropki, podczas gdy dla mniejszych lub większych rozmiarów stan podstawowy dubletu jest dominujący – dokładnie tak jak zaobserwowano eksperymentalnie dla różnych rozmiarów kropek II rodzaju [40, 49].

Włączenie pola magnetycznego wzmacnia lokalizację obu rodzajów nośników, dlatego można oczekiwać wzmocnienia wiązania poprzez efektywne potencjały Hartree dla zarówno elektronu jak i dla dziury. W ramach tego samego przybliżenia jak w przypadku bez pola magnetycznego, po jego włączeniu zaobserwować można wiązanie dziury w zerowym już przybliżeniu w dwóch możliwych lokalizacjach. Prowadzi to do pojawienia się kolejnych składowych metastabilnych ekscytonowych stanów nisko-wzbudzonych, chociaż pole magnetyczne silnie redukuje drugie minimum potencjału Hartree dla elektronu w pierwszym przybliżeniu i w efekcie otrzymujemy dublet w słabych polach i singlet w silniejszych (konkretne wartości natężenia dla odpowiedniego przejścia są rzędu 1T i zależą od rozmiaru kropki oraz krzywizny gołego potencjału). Znikanie dubletu wraz ze wzrostem pola może odpowiadać obserwacjom eksperymentalnym dla małych silnie naprężonych kropek samorosnących (możliwe więc, że z odwróconą strukturą pasmową dziur w wyniku naprężenia) [50], rys. 2.6 . Na rys. 2.7 przedstawione są profile potencjału Hartree dziury i elektronu dla kropki II rodzaju (zdefiniowanej elektrostatycznym ogniskowaniem o gaussowskim potencjale w studni typu Ga(Al)As) w funkcji rozmiaru kropki przy stałej krzywiznie (5.4 meV) dla pola magnetycznego 4 T.

Należy tu jednak zwrócić uwagę, że stosowane przybliżenie Hartree nie jest zbyt dokładne, zwłaszcza dla małej ilości cząstek (tak jak w tym przypadku) oraz dodatkowe niedokładności mogą być związane z metodą kolejnych przybliżeń zastosowaną do rozwiązania układu równań Hartree. W rozdziale 3 zo-

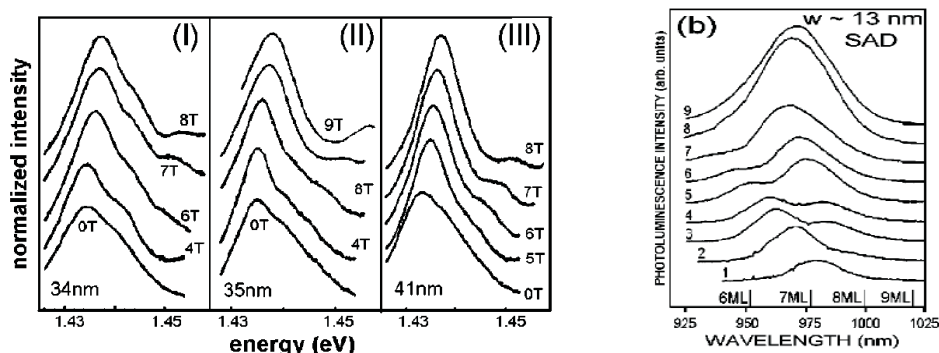


Rys. 2.5. Dwudolinowa struktura potencjału Hartree dla elektronu w zależności od rozmiaru kropki (dziura toroidalna) – wzajemna relacja intensywności pików [9] dobrze zgadza się z obserwacją eksperymentalną [40].

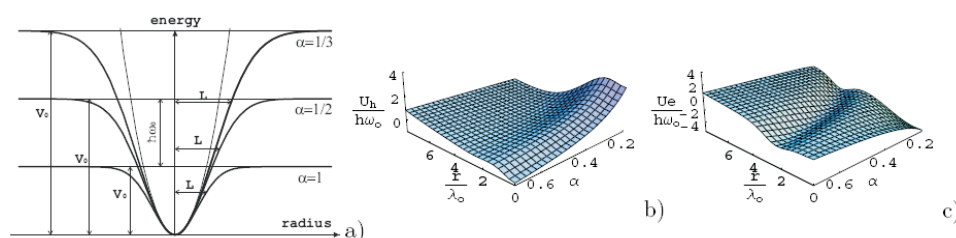
stanie przedstawiona numeryczna metoda rozwiązania zagadnienia ekscytonu w kropce kwantowej II rodzaju i wykazane zostanie, że obszar (w odniesieniu do parametrów geometrycznych i materiałowych) istnienia dubletu metastabilnego opisanego wyżej jest mniejszy niż wynikałoby to z przybliżonych oszacowań analitycznych.

2.3.1 Ekscytonowe kompleksy X^\pm w silniej wzbudzanych kropkach kwantowych II rodzaju

Wobec kontrowersji co do warunków pojawiania się ekscytonowych dubletów metastabilnych w kropkach II rodzaju, zwłaszcza bez obecności pola magnetycznego (w wyniku wyraźnego zmniejszenia siły efektu w ujęciu numerycznym w stosun-



Rys. 2.6. Znikanie dodatkowych pików fotoluminescencji wraz ze wzrostem natężenia pola magnetycznego dla małych naprężonych kropek In(Ga)As/GaAs o trzech rozmiarach [50] (lewy); ewolucja pików fotoluminescencji wraz z rozmiarem kropek dla małych naprężonych kropek samorosnącej (numery 1-9 oznaczają wzrastające rozmiary kropek) [50] – dla małych i dużych kropek dominuje stan podstawowy.



Rys. 2.7. Dwudolinowa struktura potencjału Hartree dla dziury i elektronu – profile potencjału Hartree dziury i elektronu (b,c) dla kropki II rodzaju (zdefiniowanej elektrostatycznym ogniskowaniem o gaussowskim potencjale (a) w studni typu Ga(Al)As) w funkcji rozmiaru kropki przy stałej krzywiznie (5.4 meV) dla pola magnetycznego 4 T.

ku do analitycznego przybliżonego rozwiązania zagadnienia Hartree⁴) interesujące wydaje się zbadanie struktury ekscytynu (stanu podstawowego i bliskich stanów metastabilnych) w kropce kwantowej II rodzaju silnie wzbudzonej i obsadzonej w związku z tym przez triony X^\pm (dwa elektrony i dziurę – czyli kompleks X^- , lub przez elektron i dwie dziury – czyli kompleks X^+). Zagadnienie to zostało rozwiązane w pracy [51] i w wyniku uzyskano następującą charakterystykę silnie wzbudzonych kompleksów ekscytonowych w kropkach kwantowych II rodzaju.

⁴zauważyć należy jednak, że numeryczna metoda (przedstawiona w kolejnym rozdziale) pozwala na dokładniejsze, w porównaniu z oszacowaniami analitycznymi, rozwiązanie układu równań Hartree, ale także metodą kolejnych przybliżeń; obciążona jest zatem niepewnością metody kolejnych przybliżeń jak i metody Hartree (metoda Hartree jest mało dokładna dla małej liczby cząstek i przy silnym oddziaływaniu w stosunku do energii kinetycznej, co ma właśnie miejsce w przypadku kropek kwantowych)

Rachunek został przeprowadzony również analitycznymi metodami przy rozwinięciu metody Hartree w odniesieniu do elektronu i dziury do metody Hartree-Focka dla dwóch jednakowych cząstek (dwóch elektronów lub dwóch dziur). Rozwiązanie zagadnienia trzech cząstek silnie oddziałujących przy obecności gołej kropki i antykropki (odpowiednio dla elektronu i dziury bądź odwrotnie) przeprowadzić można w schemacie kolejnych przybliżeń odpowiednich równań Hartree-Focka.

W przypadku trionu X^- funkcja Hartree ma postać,

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_h) = \psi_e(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\psi_h(\mathbf{r}_h), \quad (2.13)$$

gdzie elektronowa funkcja falowa spełnia równanie⁵,

$$\left[\sum_{i=1,2} \left(-\frac{\hbar^2}{2m_e} \Delta_i \right) + U(\mathbf{r}_i) + \frac{e^2}{\varepsilon} |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2| \right] \psi_e(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = E_e \psi_e(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (2.14)$$

z efektywnym potencjałem,

$$U_e = V_e - \frac{e^2}{\varepsilon} \int d^2r_h \frac{|\psi_h(\mathbf{r}_h)|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_h|},$$

oraz dziurowa funkcja falowa spełnia równanie,

$$\left[\frac{\hbar^2}{2m_h} \Delta_h + U_h(\mathbf{r}_h) \right] \psi_h(\mathbf{r}_h) = E_h \psi_h(\mathbf{r}_h), \quad (2.15)$$

z potencjałem Hartree,

$$U_h = V_h - \frac{2e^2}{\varepsilon} \int d^2r_1 d^2r_2 \frac{|\psi_e(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|^2}{|\mathbf{r}_h - \mathbf{r}_1|}.$$

Rozwiązanie powyższego układu równań przeprowadzić można metodą kolejnych przybliżeń (warunki stosowalności takiego przybliżenia dla niezbyt małych kropek w studni Ga(Al)As określone są w [51]).

Podobnie jak w przypadku zwykłych ekscytonów spotykamy tu dwudolinowe potencjały efektywne, co pozwala rozważać dublety stanów o tej samej symetrii (w przypadku dubletu dla stanu podstawowego, z momentem pędu 0, i w związku z tym, ze wzbronionym przejściem dipolowym między stanami dubletów). W zerowym rzędzie kolejnych przybliżeń zaniedbujemy oddziaływanie elektronów z dziurą i dla pary oddziałujących elektronów szukamy wariacyjnie stanu podstawowego,

$$\psi_e^{(0)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{\beta}{\pi l_0^2} e^{-\beta(r_1^2 + r_2^2)/(4l_0^2)}, \quad (2.16)$$

odpowiadającego przeciwnym spinom pary (l_0 jest tu skalą odległości oznaczaną poprzednio λ_{0e}). Minimum energii pary elektronów osiągnane jest dla $\beta = 1 - (\alpha/2 + \Delta\alpha)$, gdzie

$$\Delta\alpha \simeq \frac{l_0}{8a} \sqrt{2\pi/(1 - \alpha/2)} - \frac{2 - 3\alpha/2}{2 - \alpha} \left(\frac{l_0}{8a} \sqrt{2\pi/(1 - \alpha/2)} \right)^2, \quad a = \hbar^2 \varepsilon / (e^2 m_e).$$

⁵potencjał elektryczny w jednostkach Gaussa

Ta minimalna energia wynosi,

$$E_e^{(0)} \simeq \hbar\omega_0 \left[\frac{2}{\alpha} (1 - \alpha/2)^2 + \frac{l_0}{2\alpha} \sqrt{2\pi(1 - \alpha/2)} \right].$$

Wykorzystując postać zerowej funkcji elektronów znaleźć można potencjał Hartree dla dziury,

$$U_h = V_0 e^{-r^2/L^2} - \frac{2e^2}{\varepsilon l_0} \sqrt{\pi\beta} e^{-\beta r^2/l_0^2} I_0(\beta r^2/l_0^2). \quad (2.17)$$

Ten potencjał silnie zależy od rozmiarów kropki i dla dużych kropek $\alpha < 0.4(0.5)$ dla GaAs i krzywizny gołego gaussianu $\hbar\omega_0 = 5.4(7.5)$ meV, posiada dwa minima (w $r_{1h} = 0$ i w r_{3h}) oraz maximum w r_{2h} . Dla $\alpha > 0.4(0.5)$ (odpowiednio dla podanych wyżej krzywizn) drugie minimum znika. W przypadku dwudolinowego potencjału szukamy stanu podstawowego i nisko wzbudzonego stanu dubletu w postaci hybrydyzacji zlokalizowanych stanów oddzielnie dla obu jam⁶. W przypadku potencjału dwudolinowego (2.17) dla odpowiednich wartości α stan stabilny okazuje się tylko pojedynczy – w okolicy drugiego minimum (dla $\alpha < 0.4(0.5)$) i ma postać,

$$\psi_h \sim e^{-\sigma_3(r-r_{3h})^2/(2l_0^2)},$$

gdzie $\sigma_3^2 = m_h\omega_{3h}/(m_e\omega_0)$ opisuje lokalną krzywiznę drugiego minimum. Dla $\alpha > 0.4(0.5)$ pojedynczy stan (w pojedynczej jamie) zlokalizowany w centrum ma postać,

$$\psi_h \sim e^{-\sigma_1 r^2/(2l_0^2)},$$

gdzie $\sigma_1^2 = m_h\omega_{1h}/(m_e\omega_0)$.

Można następnie, korzystając z wyżej podanych funkcji, znaleźć potencjał Hartree dla elektronu, w obu przypadkach (dwudolinowego i jednodolinowego potencjału Hartree dla dziury⁷). Potencjał Hartree dla elektronów w trionie przyjmuje następującą postać,

$$U_e = \begin{cases} -V_0 e^{-r^2/L^2} - \frac{e^2}{\varepsilon l_0} \sigma_3 \sqrt{\pi} e^{-\sigma_3^2(r-r_{3h})^2/(2l_0^2)} I_0(\sigma_3^2(r-r_{3h})^2/(2l_0^2)), \\ \text{dla } \alpha < 0.4(0.5) \\ -V_0 e^{-r^2/L^2} - \frac{e^2}{\varepsilon l_0} \sigma_1 \sqrt{\pi} e^{-\sigma_1^2 r^2/(2l_0^2)} I_0(\sigma_1^2 r^2/(2l_0^2)), \text{ dla } \alpha > 0.4(0.5). \end{cases} \quad (2.18)$$

⁶taka metoda, wykonalna analitycznie, z pewnością traci na dokładności w przypadku silnej różnicy głębokości obu jam dwudolinowego potencjału

⁷należy zauważyć, że w przypadku kompleksu X^- dwa elektrony silniej lokalizują dziurę, niż pojedynczy elektron w zwykłym ekscytonie X , dlatego dwudolinowa struktura potencjału Hartree dziury występuje dla trionu wyłącznie dla dostatecznie dużych kropek, podczas gdy dla zwykłego ekscytonu – dla znacznie większego zakresu rozmiarów kropek, także małych

Łatwo sprawdzić, że potencjał U_e jest dwudolinowy dla $\alpha < 0.4(0.5)$ i jednodolinowy dla $\alpha > 0.4(0.5)$ ⁸. Dla elektronów należy znaleźć funkcję falową dwóch elektronów razem przy uwzględnieniu ich oddziaływania umieszczonych w potencjale Hartree od przechwyconej dziury. Zagadnienie takie można rozwiązać w przybliżeniu Hartree-Focka, tzn. uwzględniając nieodróżnialność obu elektronów⁹. Przybliżenie Hartree-Focka z natury jest efektywnym opisem jednocząstkowym i stany singletowe (spinowo antysymetryczne) muszą być opisane symetryczną funkcją orbitalną, podczas gdy trypletowe (spinowo symetryczne) antysymetryczną funkcją orbitalną. Budowa symetrycznej funkcji stanu wzbudzonego dopuszcza dla stanu podstawowego iloczyn efektywnych jednocząstkowych funkcji $\psi_e^1(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_{1e}(\mathbf{r}_1)\psi_{1e}(\mathbf{r}_2)$. Gdy jeden z elektronów znajduje się w metastabilnym stanie dubletu (związanego z podwójną jamą U_e), to dopuszczalne są stany singletowe i trypletowe,

$$\psi_e^{2(s,t)} = \frac{1}{\sqrt{2}}[\psi_{1e}(r_1)\psi_{2e}(r_2) \pm \psi_{1e}(r_2)\psi_{2e}(r_1)].$$

Wreszcie, gdy obydwa elektrony są w wyższych stanach dubletu, ponownie dopuszczalny jest tylko stan singletowy, $\psi_e^3(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_{2e}(\mathbf{r}_1)\psi_{2e}(\mathbf{r}_2)$.

Energie tych czterech stanów pary elektronów wyrażają się w następujący sposób,

$$E_e^1 = 2\epsilon_{e1} + \frac{e^2}{\epsilon} \int d^2r_1 d^2r_2 \frac{|\psi_{1e}(r_1)\psi_{1e}(r_2)|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}, \quad (2.19)$$

$$E_2^{2(s,t)} = \epsilon_e^1 + \epsilon_e^2 + K \pm A, \quad (2.20)$$

gdzie całki, prosta i wymiany, mają postać, $K = \frac{e^2}{\epsilon} \int d^2r_1 d^2r_2 \frac{|\psi_{1e}(r_1)\psi_{2e}(r_2)|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$, oraz $A = \frac{e^2}{\epsilon} \int d^2r_1 d^2r_2 \frac{\psi_{1e}^*(r_1)\psi_{2e}^*(r_1)\psi_{1e}(r_2)\psi_{2e}(r_2)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$,

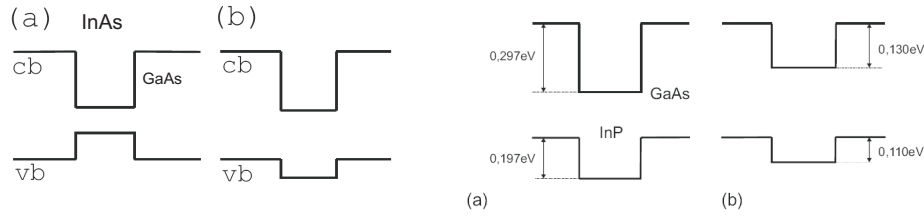
$$E_e^2 = 2\epsilon_{e2} + \frac{e^2}{\epsilon} \int d^2r_1 d^2r_2 \frac{|\psi_{2e}(r_1)\psi_{2e}(r_2)|^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}. \quad (2.21)$$

Powyższa struktura pary elektronów możliwa jest dla $\alpha < 0.4(0.5)$, jeśli natomiast $\alpha > 0.4(0.5)$, wtedy możliwy jest tylko stan singletowy, $\psi^e(r_1, r_2) = \psi_{e1}(r_1)\psi_{e1}(r_2)$ ¹⁰ o energii E_e^1 .

⁸dwudolinowość potencjału Hartree dla elektronu wynika z toroidalnego kształtu funkcji falowej dziury i dlatego dla dziury zlokalizowanej w centrum nie pojawia się; w metodzie numerycznej prezentowanej w następnym rozdziale uzyskać można podobne wyniki, chociaż druga dolina jest znacznie płytsza i występuje dla przesuniętych parametrów – taka rozbieżność wiąże się z przeszacowaniem oddziaływania Hartree w rachunku analitycznym

⁹w przypadku dwóch cząstek, elektronu i dziury nie było takiej możliwości i dlatego wystarczało przybliżenie Hartree

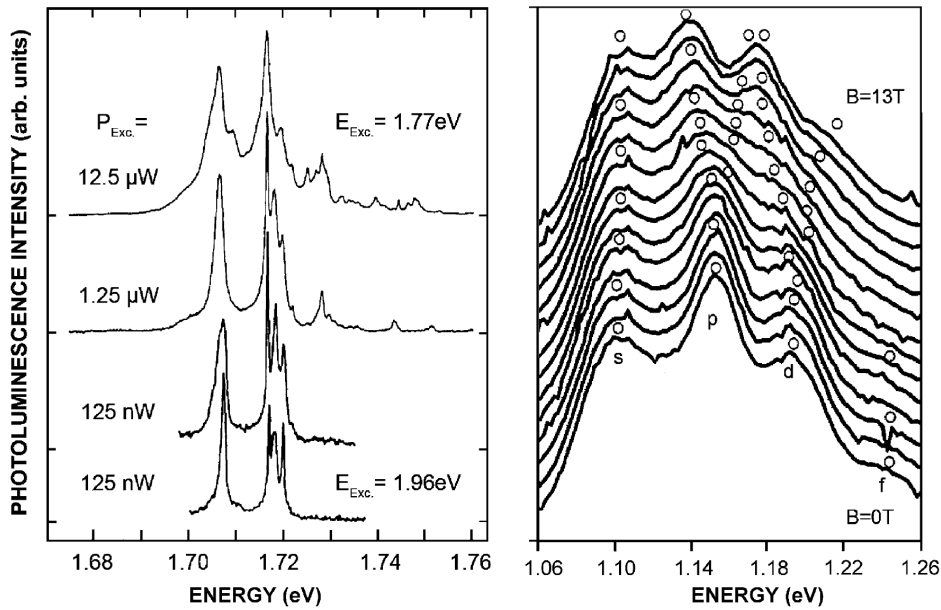
¹⁰rozważamy tu stany z momentem pędu 0, ponieważ poszukujemy w strukturze trionów także stanów metastabilnych ze wzbronionym przejściem dipolowym; stany te muszą być nisko leżące energetycznie – wynikłe z rozszczepienia w podwójnych dolinach stanu podstawowego, a nie wyżej-energetyczne stany wzbudzone też o zerowym momencie pędu, czyli izotropowe (nie zależące od kąta azymutalnego); zauważyć tu można, że posługując się rachunkiem numerycznym



Rys. 2.8. Możliwe odwrócenie studni dla dziur (b) na skutek naprężeń wynikających z niedopasowania sieciowego doprowadzić może do zmiany kropki nominalnie I rodzaju InAs/GaAs (z porównania energii krawędzi pasm walencyjnego i przewodnictwa w materiale litym) (a) na kropkę II rodzaju (b) [43] (lewy); struktura pasm w samorosnącej kropce II rodzaju InP/GaAs, nominalnie (a) i przesunięta w wyniku naprężeń (b) (prawy).

Z wyżej przedstawionej analizy wynika, że struktura trionu w kropce drugiego rodzaju sprowadza się do czterech stanów (podstawowy i trzy metastabilne na przejścia dipolowe) dla dostatecznie dużych kropek, podczas gdy dla małych kropek trzy nisko leżące stany metastabilne znikają. Spośród trzech metastabilnych stanów dwa, s, t , są prawie zdegenerowane, ponieważ całka wymiany w kropce jest bardzo mała. Zatem struktura trionów w kropkach dużych ($\alpha < 0.4(0.5)$ dla $\hbar\omega_0 = 5.4(7.5)$ meV) uzasadniać może obecność trzech bliskich pików luminescencji (zablokowanych wzbronionym przejściem dipolowym i wolno termalizowanych w niskich temperaturach), podczas gdy dla małych kropek i silnie wzbudzonych stanów trionowych tylko pojedyncza struktura pików luminescencji powinna być obecna w okolicach stanu podstawowego. Włączenie pola magnetycznego prowadzi do wzrostu całki wymiany i powoduje rozszczepienie prawie zdegenerowanej pary s, t , co w przypadku dużych kropek może być przyczyną pojawienia się czwartego pików fotoluminescencyjnego w silniej wzbudzonych kropkach II rodzaju w obecności pola magnetycznego. Pojawianie się czwartego pików zaobserwowano eksperymentalnie wraz ze wzrostem pola magnetycznego w kropce InAs/GaAs [52] (gdzie w wyniku naprężeń mogła zostać odwrócona struktura pasmowa dziur i nominalnie kropka I rodzaju mogła być kropką II rodzaju), a pojawianie się trzeciego pików (bez pola magnetycznego) zaobserwowano w kropce II rodzaju (dużej, o ~ 450 nm średnicy, dyfuzyjnej kropce) [39] wraz ze wzrostem intensywności wzbudzenia, rys. 2.9. Wyniki te wydają się zgodne z opisaną wyżej strukturą ekscytonów i trionów w kropkach II rodzaju, w ramach przybliżenia Hartree.

(jak zostanie to przedstawione w następnym rozdziale) odróżnienie niskich stanów o zerowym momencie pędu możliwe jest poprzez identyfikację przy pomocy twierdzenia oscylacyjnego, czyli wg liczby węzłów odpowiedniej funkcji falowej

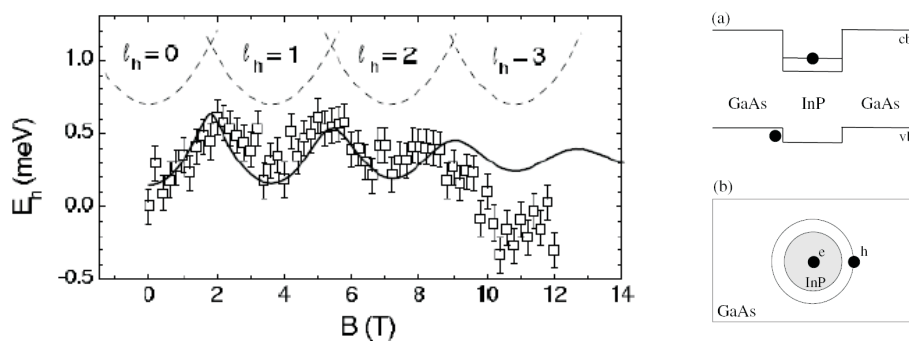


Rys. 2.9. Eksperymentalnie zaobserwowane pojawianie się trzeciego pików fotoluminescencji w pobliżu stanu podstawowego trionu dla dużej kropki wytworzonej dyfuzją wywołaną ogniskowaniem laserowym wraz ze wzrostem intensywności wzbudzenia bez obecności pola magnetycznego [39] (lewy) i pojawianie się czwartego pików luminescencji wraz ze wzrostem pola magnetycznego dla silnie wzbudzonych kropek samorosnących InAs/GaAs o prawdopodobnej odwróconej studni dla dziury na skutek naprężeń wynikających z niedopasowania sieciowego [52] (prawy) – obie obserwacje wydają się potwierdzać opisaną wyżej strukturę trionów w kropkach II rodzaju.

2.4 Stany ekscytonowe w potencjale zjonizowanej domieszki i odróżnianie potencjałów wiążących nanostruktur metodami optycznymi

Zbadanie struktury ekscytonów i bardziej złożonych kompleksów (trionów) w kropkach kwantowych II rodzaju ma znaczenie dla podania charakterystycznych cech widma fotoluminescencji w celu rozróżniania typów kropek metodami optycznymi. Opisana powyżej struktura metastabilnych stanów a także toroidalny kształt funkcji falowej złapanej cząstki mimo antykropkowego jej odpychania (w rozpatrywanym przypadku, dziury) wydają się stanowić podstawę sposobu odróżnienia kropek rodzaju II od kropek rodzaju I, dla których nie występują podobne efekty. Pojawianie się metastabilnych wzbudzeń trionowych w silnie wzbudzanych kropkach oraz wzrost z trzech do czterech liczby pików blisko położonych przy stanie podstawowym wraz ze wzrostem pola magnetycznego, a także znikanie podwójnego pików w słabo wzbudzonych kropkach wraz ze wzro-

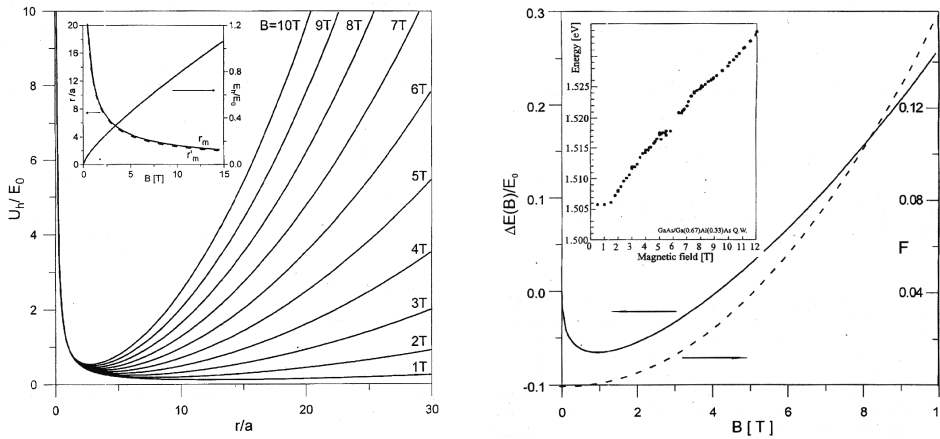
stem pola magnetycznego oraz pojawianie się trzeciego pików bez obecności pola magnetycznego wraz ze wzrostem intensywności wzbudzenia, i wreszcie oscylacje Aharonova-Bohma odpowiadające kwantowaniu strumienia przez toroidalny stan jednocząstkowy (rys. 2.10) — to cechy, które są charakterystyczne dla kropek II rodzaju i nie występują w przypadku daleko prostszej struktury ekscytonów i tryonów w kropkach I rodzaju. Zatem odróżnienie typu potencjału wiążącego w nanostrukturze (często odmiennej od nominalnie przewidywanej w wyniku lokalnych naprężeń lub domieszkowania) wydaje się możliwe metodami czysto optycznymi, zwłaszcza w obecności pola magnetycznego o regulowanym natężeniu. Pojawia się tu jednak istotny problem odróżnienia potencjału wiążącego kropki II rodzaju od podobnie wiążącego potencjału zjonizowanej domieszki (akceptora lub donora). Taka zjonizowana domieszka przyciąga elektron i odpycha dziurę (lub odwrotnie) zupełnie podobnie do kropki II rodzaju. Różnica polega na osobliwości potencjału zjonizowanej domieszki umieszczonej w kwazi-2D studni kwantowej. W przeciwieństwie do tej sytuacji potencjał wiążący kropki kwantowej nie jest osobliwy i dlatego dopuszcza aproksymację w swoim minimum (zwykle centrum kropki) poprzez potencjał paraboliczny. Jeśli jednak zjonizowana domieszka znajduje się w bliskim sąsiedztwie studni kwantowej (w materiale brzegu studni), wówczas ogon osobliwego potencjału w płaszczyźnie studni nie ma już osobliwości (cięcie hiperboloidy płaszczyzną). Przeanalizowanie struktury ekscytonu związanego na zjonizowanej domieszce ułożonej w studni lub wysuniętej w brzeg studni jest kolejnym elementem przedstawianej koncepcji rozróżniania nanoskopowych struktur lokalizujących wzbudzenia przy pomocy metod optycznych [53].



Rys. 2.10. Energia dziury zlokalizowanej w toroidalnym stanie w kropce InP/GaAs wykazuje oscylacje związane z kwantowaniem strumienia pola magnetycznego (oscylacje typu Aharonova-Bohma) – wg [45] (lewy) i schemat samorośnącej kropki kwantowej II rodzaju InP/GaAs (prawy).

W pracy [54] zbadano zagadnienie możliwości wiązania ekscytonu na zjonizowanym donorze (akceptorze) w kwazi-2D studni kwantowej, w analogii do wiązania ekscytonu przez kropkę II rodzaju. Stosując ten sam schemat przybliżenia Hartree wykazano zasadniczą różnicę spowodowaną przez osobliwość w

centrum potencjału zjonizowanego donoru. Okazuje się, że elektron złapany przez zjonizowany donor zbyt słabo przyciąga dziurę, by pokonać osobliwe odpychanie dziury i w ten sposób nie tworzy się zlokalizowany ekscyton na zjonizowanym donorze w przypadku idealnej studni 2D (co potwierdza kształt potencjału Hartree dla dziury). Dopiero włączenie pola magnetycznego, wzmacniając lokalizację nośników obu znaków, powoduje pojawienie się doliny (ale pojedynczej, w przeciwieństwie do kropki II rodzaju) w efektywnym potencjale Hartree dla dziury, rys. 2.11 a. Powstaje możliwość związania ekscytonu w obecności pola magnetycznego na zjonizowanej domieszce – stan taki, nazywany magnetoekscytonem, potwierdzony jest eksperymentalnie [55]. Przekonującym argumentem za zgodnością opisu Hartree z realnym układem jest poprawnie przewidziana zależność energetycznego przesunięcia piku luminescencji magnetoekscytonu w funkcji pola magnetycznego (w GaAs), a w szczególności początkowy niewielki spadek energii w zakresie do 2 T a następnie silny wzrost energii magnetoekscytonu w zakresie do do 12 T (o nachyleniu zgodnym z oszacowaniem Hartree), rys. 2.11 b.

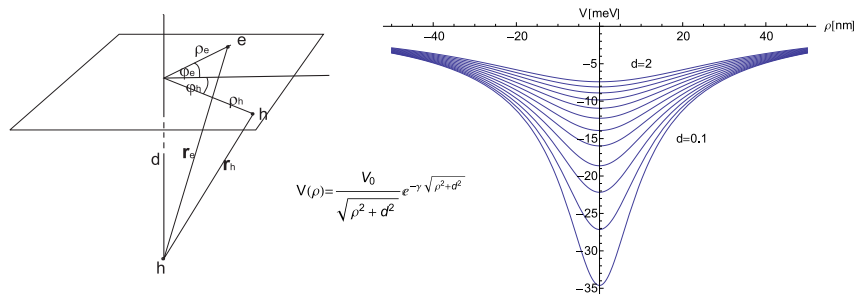


Rys. 2.11. Jednodolinowy potencjał Hartree dla dziury w przypadku zjonizowanego donoru w studni 2D ze złapanym elektronem, w zależności od pola magnetycznego, wg [54] (a); zależność energii magnetoekscytonu zlokalizowanego na zjonizowanym donorze w zależności od pola magnetycznego (b), wstawka – eksperymentalnie zmierzona energia magnetoekscytonu w funkcji pola magnetycznego, wg [55].

Brak podwójnych studni potencjałów Hartree w przypadku magnetoekscytonu i jego specyficzne zachowanie w polu magnetycznym (pojawianie się dopiero w polu magnetycznym i charakterystyczna zmiana położenia energetycznego) wydają się wystarczającymi cechami pozwalającymi na odróżnienie od kropki II rodzaju (i także I rodzaju) poprzez porównanie widma fotoluminescencji dla każdego typu potencjału wiążącego. Jednodolinowy potencjał Hartree dla dziury w obecności pola magnetycznego ma minimum poza centrum (w odległości mniejszej niż efektywny promień Bohra $a = \epsilon\hbar^2/(2m_e e^2)$) i wolno rośnie wraz z polem magne-

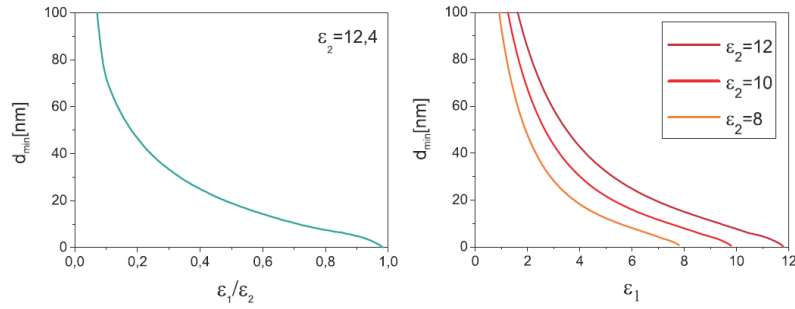
tycznym). Odpowiadający zlokalizowany stan dziury magnetoekscytonu będzie miał zatem toroidalny kształt, co prowadzić powinno do kwantowania strumienia pola magnetycznego. Teoretyczne badania stanów ekscytonowych lokalizowanych na zjonizowanej domieszce przeprowadzano też innymi metodami poszukując możliwości wiązania ekscytonu przy rozmaitych modyfikacjach modelowych. Uwzględniano różne możliwości stosunku mas efektywnych elektronów i dziur w studni, zmiany przenikalności dielektrycznej studni i bariery oraz uwzględniano skończoną grubość studni [56, 57, 58], niekoniecznie jednak w korespondencji z materiałowymi parametrami i ściśle 2D modelem studni, przy których określono wyżej opisany potencjał Hartree dziury dla zjonizowanego donoru. W tych pracach dyskutowano warunki (głównie stosunku mas nośników i grubości studni), przy których pojawić by się mogło wiązanie ekscytonu na zjonizowanym donorze.

Kiedy jednak zjonizowana domieszka jest wysunięta poza studnię 2D, potencjał działający na nośniki uwięzione w studni nie ma już osobliwości (rys. 2.12) i powstaje pytanie o możliwość pojawienia się wielodolinowej struktury potencjałów Hartree a także o możliwość wiązania ekscytonu bez obecności pola magnetycznego. Zadanie to zostało przeanalizowane metodami numerycznymi [59]. W wyniku uzyskano opis wpływu oddalenia zjonizowanego donoru na efektywny potencjał Hartree dla dziury w studni kwantowej. Zauważono, że przy wzroście odległości domieszki od studni (na skali kilku nm dla GaAs) potencjał wiążący dziury pozwala nawet na jej lokalizację w centrum efektywnej studni wynikającej z cięcia potencjału hiperbolicznego domieszki przez płaszczyznę studni. Znaleziona zależność istnienia stanu związanego od odległości ulokowania zjonizowanego donoru od studni, w ramach przybliżenia Hartree i dla ściśle 2D modelu studni, przedstawiona jest na rys. 2.13, w funkcji stosunku stałych dielektrycznych materiału studni i bariery.



Rys. 2.12. Ilustracja sposobu oddziaływania potencjału zjonizowanej domieszki (wiążącego dla elektronu i anti-wiążącego dla dziury) wysuniętej prostopadle do płaszczyzny studni kwantowej o odległość d na nośniki uwięzione w studni (z lewej); zależność kształtu potencjału od odległości wysunięcia domieszki z uwzględnieniem ekranowania parametryzowanego stałą γ (z prawej).

Graniczne zachowanie przy jednakowych stałych dielektrycznych materiału



Rys. 2.13. Odległość ulokowania donoru w barierze studni względem płaszczyzny studni, przy której następuje związanie ekscytynu w 2D studni na projekcji potencjału donoru w tej studni w zależności od stosunku przenikalności dielektrycznej materiału studni ϵ_1 i bariery ϵ_2 .

studni i bariery, przy których krytyczna odległość donoru od studni (określająca powstawanie zlokalizowanego ekscytynu w studni) wydaje się dążyć do zera, rys. 2.13, może być mylące, ponieważ numerycznie uzyskiwany odpowiedni stan związany jest mocno dyskusyjny z uwagi na ultra-płytki charakter jego wiązania, co może być artefaktem przybliżenia (w tym przypadku modelu Hartree i może być poza tym likwidowane przez drobne nawet, nieuwzględnione w idealnym modelu, szczegóły struktury).

Rozdział 3

Badanie stanów ekscytonowych metodami numerycznymi

Ze względu na wskazaną w rozdziale 2 potencjalną możliwość przeszacowania członu Hartree w podejściu analitycznym wynikającą z niedokładności metody wariacyjnej, zdecydowano się zweryfikować otrzymane rezultaty za pomocą dokładniejszych metod numerycznych.

W dalszym ciągu stosować tutaj będziemy przybliżenie Hartree i metodę samouzgodnionych potencjałów, jednak funkcje i wektory własne hamiltonianu:

$$\left[\frac{(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A})^2}{2m_{e(h)}} + U_{e(h)}(\mathbf{r}) \right] \psi_{e(h)}(\mathbf{r}) = E_{e(h)} \psi_{e(h)}(\mathbf{r}), \quad (3.1)$$

oraz całkę w potencjałach Hartree (por. podrozdział 2.2):

$$U_{e(h)}(\mathbf{r}) = V_{e(h)}(\mathbf{r}) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon} \int \frac{|\psi_{h(e)}(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' \quad (3.2)$$

wyznaczać będziemy numerycznie, porzucając niedokładne przybliżenia wariacyjne. W podejściu numerycznym powtarzać będziemy obliczanie samouzgodnionych potencjałów Hartree, poprawiając je funkcjami falowymi uzyskanymi w poprzednim kroku, aż do momentu uzyskania zgodności w kolejnych krokach (inaczej niż w mocno ograniczonych pod tym względem obliczeniach analitycznych, gdzie pod uwagę brane było tylko kilka pierwszych iteracji rachunku Hartree)¹.

¹przeprowadzone obliczenia numeryczne pokazały, że w przypadku kropek II rodzaju – dla rozmiarów, przy których dziura lokalizowana jest w drugiej jamie (zob. podrozdział 3.3), samouzgodniona procedura Hartree daje spójne rezultaty zazwyczaj już po 3 iteracjach, natomiast w przypadku dziury zlokalizowanej w centrum kropki – wymagane jest przeprowadzenie nawet do kilkunastu iteracji.

Przedstawiona w niniejszym rozdziale metoda numeryczna umożliwiła znajdowanie stanów o symetrii cylindrycznej, tj. z zerowym momentem pędu, dla dowolnych gołych potencjałów wiążących. W szczególności można znajdować takie stany dla rozpatrywanych poprzednio potencjałów kropki kwantowej II rodzaju, I rodzaju lub potencjału zjonizowanego donoru. Można zatem oczekiwać, że w ten sposób zauważone zostaną też nisko leżące stany dubletów o tej samej symetrii w stosunku do stanu podstawowego, opisywane poprzednio przybliżeniem analitycznym (można je identyfikować zgodnie z twierdzeniem oscylacyjnym wg liczby węzłów – wyżej leżące stany o symetrii cylindrycznej będą miały wzrastającą liczbę węzłów).

3.1 Zagadnienie jednocząstkowe w postaci bezwymiarowej we współrzędnych cylindrycznych

Hamiltonian w równaniu (3.1) możemy rozpisać w postaci:

$$\hat{H}_{e(h)} = \frac{(\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A})^2}{2m_{e(h)}} + U_{e(h)} = \frac{1}{2m_{e(h)}} \left(\hat{\mathbf{p}}^2 - e\hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A} - e\mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}} + e^2\mathbf{A}^2 \right) + U_{e(h)}. \quad (3.3)$$

Dla stałego zewnętrznego pola magnetycznego prostopadłego do płaszczyzny kropki cechowanie potencjału wektorowego \mathbf{A} wybrane podobnie jak w rozdziale 2 możemy zapisać we współrzędnych cylindrycznych w postaci:

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r} = \frac{1}{2} B \rho \mathbf{n}_\varphi. \quad (3.4)$$

Wtedy:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{A} &= \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} (\rho A_\rho) + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} A_\varphi + \frac{\partial}{\partial z} A_z = 0, \\ \mathbf{A} \cdot \hat{\mathbf{p}} &= A_\varphi \hat{p}_\varphi = \frac{1}{2} B \rho \left(\frac{\hbar}{i} \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) = -\frac{i\hbar B}{2} \frac{\partial}{\partial \varphi}. \end{aligned}$$

Zakładając cylindryczną symetrię potencjału wiążącego $V_{e(h)} = V_{e(h)}(\rho, z)$ możemy hamiltonian (3.3) zapisać w całości we współrzędnych cylindrycznych w postaci:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{e(h)} &= -\frac{\hbar^2}{2m_{e(h)}} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \\ &\quad + \frac{i\hbar e B}{2m_{e(h)}} \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{e^2 B^2}{8m_{e(h)}} \rho^2 + V_{e(h)}(\rho, z), \end{aligned} \quad (3.5)$$

Jednocząstkowe funkcje falowe możemy przedstawić w postaci iloczynów:

$$\psi_{e(h)}^{l,i}(\rho, \varphi, z) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{il_e(h)\varphi} \phi_{e(h)}^{l,i}(\rho, z), \quad l_{e(h)} = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (3.6)$$

Po ich podstawieniu do jednocząstkowych równań Schrödingera z hamiltonianem (3.5) otrzymujemy następującą postać zagadnienia własnego:

$$\hat{H}_{e(h)}^l \phi_{e(h)}^{l,i}(\rho, z) = E_{e(h)}^{l,i} \phi_{e(h)}^{l,i}(\rho, z), \quad (3.7)$$

z hamiltonianem:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{e(h)}^l = & -\frac{\hbar^2}{2m_{e(h)}} \left[\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) - \frac{l_{e(h)}^2}{\rho^2} + \frac{\partial}{\partial z^2} \right] \\ & - \frac{l}{2} \hbar \omega_{ce(h)} + \frac{1}{8} m_{e(h)} \omega_{ce(h)}^2 \rho^2 + V_{e(h)}(\rho, z), \end{aligned} \quad (3.8)$$

gdzie $\omega_{ce(h)} \equiv \frac{eB}{m_{e(h)}}$ jest częstością cyklotronową cząstki w polu magnetycznym.

Wprowadzając skalę energii $\hbar\omega_0$ (odpowiadająca krzywiznie potencjału gaussowskiego wg. definicji w podrozdziale 2.1) oraz skalę długości $\lambda_0 = \sqrt{\hbar/(m_e\omega_0)}$ (por. podrozdział 2.3) i pomijając zależność od z (przybliżenie płaskiej kropki), równanie (3.7) możemy przepisać w postaci bezwymiarowej:

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial x} \left(x \frac{\partial}{\partial x} \right) + \frac{l_{e(h)}^2}{2} \frac{1}{x^2} + u_{e(h)}(x) \right] \phi_{e(h)}(\lambda_0 x) = \varepsilon_{e(h)} \phi_{e(h)}(\lambda_0 x), \quad (3.9)$$

gdzie $x = \frac{\rho}{\lambda_0}$ oraz:

$$\varepsilon_{e(h)} = \frac{m_{e(h)}}{m_e} \left(\frac{E_{e(h)}}{\hbar\omega_0} + \frac{l_{e(h)}}{2} \frac{\omega_{ce(h)}}{\omega_0} \right), \quad (3.10)$$

$$u_{e(h)}(x) = \frac{1}{8} \left(\frac{m_{e(h)}}{m_e} \right)^2 \frac{\omega_{ce(h)}^2}{\omega_0^2} x^2 + \frac{m_{e(h)}}{m_e} \frac{1}{\hbar\omega_0} U_{e(h)}(\lambda_0 x). \quad (3.11)$$

3.2 Metoda numeryczna

3.2.1 Dyskretyzacja zagadnienia jednocząstkowego i sprowadzanie hamiltonianu do postaci symetrycznej macierzy trójdiagonalnej

W celu numerycznego rozwiązania zagadnienia własnego (3.7) sprowadzamy je do postaci dyskretnej, rozpisując na siatce jednorodnej z zastosowaniem aproksymacji pochodnych w postaci różnic skończonych, co daje trójdiagonalną postać macierzy hamiltonianu. W rozpatrywanym przez nas dwuwymiarowym zagadnieniu we współrzędnych biegunowych (w przeciwieństwie do analogicznego jednowymiarowego zagadnienia we współrzędnych kartezjańskich) macierz hamiltonianu nie jest jednak macierzą symetryczną (wektory własne tego hamiltonianu nie są z przestrzeni Hilberta), i konieczne jest jej sprowadzenie do postaci symetrycznej, dla której dopiero można zastosować dobrze rozpoznane i efektywne metody znajdowania wartości i wektorów własnych symetrycznych macierzy trójdiagonalnych. Opisana poniżej, stosowana przez nas metoda symetryzacji zaadoptowana została z pracy [60].

Równanie (3.7) przepisujemy w postaci:

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{1}{x} \frac{\partial}{\partial x} \left(x \frac{\partial}{\partial x} \right) + \Lambda(x) \right] \phi(\lambda_0 x) = \varepsilon \phi(\lambda_0 x), \quad (3.12)$$

gdzie:

$$\Lambda(x) = \frac{l_{e(h)}^2}{2} \frac{1}{x^2} + \frac{1}{8} \left(\frac{m_{e(h)}}{m_e} \right)^2 \frac{\omega_{ce(h)}^2}{\omega_0^2} x^2 + \frac{m_{e(h)}}{m_e} \frac{1}{\hbar \omega_0} U_{e(h)}(\lambda_0 x).$$

Wprowadzając dyskretną siatkę numeryczną x_j i oznaczając:

$$x \frac{\partial \phi}{\partial x} \equiv f$$

możemy wyrazić wartości f w punktach siatki $j - \frac{1}{2}$ oraz $j + \frac{1}{2}$ w następujący sposób za pomocą różnic skończonych:

$$f_{j-\frac{1}{2}} = x_{j-\frac{1}{2}} \frac{\phi_j - \phi_{j-1}}{x_j - x_{j-1}},$$

$$f_{j+\frac{1}{2}} = x_{j+\frac{1}{2}} \frac{\phi_{j+1} - \phi_j}{x_{j+1} - x_j}.$$

Wobec tego zdyskretyzowaną postać całego członu różniczkowego w równaniu (3.12) w punktach j siatki możemy zapisać w analogiczny sposób w postaci:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2} \frac{1}{x} \frac{\partial f}{\partial x} \Big|_{x=x_j} &= -\frac{1}{2} \frac{1}{x_j} \frac{f_{j+\frac{1}{2}} - f_{j-\frac{1}{2}}}{x_{j+\frac{1}{2}} - x_{j-\frac{1}{2}}} = \\ &= -\frac{1}{2} \frac{1}{x_j} \frac{1}{x_{j+\frac{1}{2}} - x_{j-\frac{1}{2}}} \left[x_{j+\frac{1}{2}} \frac{\phi_{j+1} - \phi_j}{x_{j+1} - x_j} - x_{j-\frac{1}{2}} \frac{\phi_j - \phi_{j-1}}{x_j - x_{j-1}} \right]. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Przyjmując $x_j = (x_{j+\frac{1}{2}} + x_{j-\frac{1}{2}})/2$ wprowadzamy wielkość h_j zdefiniowaną następująco:

$$x_j (x_{j+\frac{1}{2}} - x_{j-\frac{1}{2}}) = \frac{x_{j+\frac{1}{2}}^2 - x_{j-\frac{1}{2}}^2}{2} \equiv h_j^2. \quad (3.14)$$

Wyrażenie (3.13) możemy teraz przepisać w postaci:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{2} \frac{1}{x} \frac{\partial f}{\partial x} \Big|_{x=x_j} &= -\frac{1}{2} \frac{1}{h_j^2} \left[\left(\frac{x_{j-\frac{1}{2}}}{x_j - x_{j-1}} \right) \phi_{j-1} - \right. \\ &\quad \left. - \left(\frac{x_{j+\frac{1}{2}}}{x_{j+1} - x_j} + \frac{x_{j-\frac{1}{2}}}{x_j - x_{j-1}} \right) \phi_{j-1} + \left(\frac{x_{j+\frac{1}{2}}}{x_{j+1} - x_j} \right) \phi_{j+1} \right]. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Człon $\Lambda(x)\phi(x)$ na siatce x_j przyjmuje postać $\Lambda(x_j)\phi_j$ i ostatecznie dyskretną postać równania (3.12) możemy zapisać w formie układu równań:

$$\begin{aligned} & \vdots \\ H_{j,j-1}\phi_{j-1} + H_{j,j}\phi_j + H_{j,j+1}\phi_{j+1} &= \varepsilon\phi_j \\ H_{j+1,j}\phi_j + H_{j+1,j+1}\phi_{j+1} + H_{j+1,j+2}\phi_{j+2} &= \varepsilon\phi_{j+1} \\ & \vdots \end{aligned}$$

lub w postaci skróconej:

$$\sum_j H_{i,j} \phi_j = \varepsilon \phi_i, \quad (3.16)$$

gdzie $H_{i,j}$ jest macierzą trójdiagonalną o elementach:

$$\begin{aligned} H_{j,j-1} &= -\frac{1}{2} \frac{1}{h_j^2} \left(\frac{x_{j-\frac{1}{2}}}{x_j - x_{j-1}} \right), & j &= i-1, \\ H_{j,j} &= +\frac{1}{2} \frac{1}{h_j^2} \left(\frac{x_{j+\frac{1}{2}}}{x_{j+1} - x_j} + \frac{x_{j-\frac{1}{2}}}{x_j - x_{j-1}} \right), & j &= i, \\ H_{j,j+1} &= -\frac{1}{2} \frac{1}{h_j^2} \left(\frac{x_{j+\frac{1}{2}}}{x_{j+1} - x_j} \right), & j &= i+1, \end{aligned} \quad (3.17)$$

oraz $H_{j,j} = 0$ w pozostałych przypadkach.

Zgodnie z wcześniejszymi uwagami widać, że $H_{i,j}$ nie jest macierzą symetryczną, można jednak w prosty sposób sprowadzić ją do postaci symetrycznej, wprowadzając:

$$\xi_j \equiv h_j \phi_j. \quad (3.18)$$

Równanie (3.16) przechodzi teraz w

$$\sum_j H_{i,j} \frac{h_i}{h_j} \xi_j \equiv \sum_j H'_{i,j} \xi_j = \varepsilon \xi_j,$$

gdzie

$$\begin{aligned} H'_{j,j+1} &= H_{j,j+1} \frac{h_j}{h_{j+1}} = -\frac{1}{2} \frac{1}{h_j^2} \frac{h_j}{h_{j+1}} \left(\frac{x_{j+\frac{1}{2}}}{x_{j+1} - x_j} \right) = -\frac{1}{2} \frac{1}{h_j h_{j+1}} \left(\frac{x_{j+\frac{1}{2}}}{x_{j+1} - x_j} \right) \\ H'_{j+1,j} &= H_{j+1,j} \frac{h_{j+1}}{h_j} = -\frac{1}{2} \frac{1}{h_{j+1}^2} \frac{h_{j+1}}{h_j} \left(\frac{x_{j+\frac{1}{2}}}{x_{j+1} - x_j} \right) = -\frac{1}{2} \frac{1}{h_{j+1} h_j} \left(\frac{x_{j+\frac{1}{2}}}{x_{j+1} - x_j} \right) \end{aligned}$$

Widać, że $H'_{j,j+1} = H'_{j+1,j}$, czyli $H'_{i,j}$ jest symetryczną macierzą trójdiagonalną odpowiadającą zagadnieniu własnemu:

$$\sum_j H'_{i,j} \xi_j = \varepsilon \xi_j, \quad (3.19)$$

bądź po rozpisaniu:

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2} \frac{1}{h_j h_{j-1}} \left(\frac{x_{j-\frac{1}{2}}}{x_j - x_{j-1}} \right) \xi_{j-1} + \\ & + \left[\frac{1}{2} \frac{1}{h_j^2} \left(\frac{x_{j+\frac{1}{2}}}{x_{j+1} - x_j} + \frac{x_{j-\frac{1}{2}}}{x_j - x_{j-1}} \right) + \Lambda(x_j) \right] \xi_j + \\ & - \frac{1}{2} \frac{1}{h_j h_{j+1}} \left(\frac{x_{j+\frac{1}{2}}}{x_{j+1} - x_j} \right) \xi_{j+1} = \varepsilon \xi_j. \end{aligned} \quad (3.20)$$

dla wektorów własnych ξ pozostających w relacji do wektorów własnych ϕ wyjściowego zagadnienia (3.12) zgodnie z zależnością (3.18).

Wektory diagonalne i pozadiagonalne hamiltonianu $H'_{i,j}$ mają odpowiednio postać:

$$\begin{aligned} d_j &= \frac{1}{2} \frac{1}{h_j^2} \left(\frac{x_{j+\frac{1}{2}}}{x_{j+1} - x_j} + \frac{x_{j-\frac{1}{2}}}{x_j - x_{j-1}} \right) + \Lambda(x_j) \quad (j = 0, 1, \dots, n-1), \\ e_j &= -\frac{1}{2} \frac{1}{h_j h_{j+1}} \left(\frac{x_{j+\frac{1}{2}}}{x_{j+1} - x_j} \right) \quad (j = 0, 1, \dots, n-2), \end{aligned} \quad (3.21)$$

gdzie

$$h_j = \sqrt{\frac{x_{j+\frac{1}{2}}^2 - x_{j-\frac{1}{2}}^2}{2}} \quad (j = 0, 1, \dots, n-1).$$

Kluczowym punktem opisaney metody przekształcania zagadnienia algebraicznego (3.12) do postaci symetrycznej macierzy trójdiagonalnej jest przekształcenie (3.18). Wektory własne ϕ hamiltonianu H nie są z przestrzeni Hilberta i dopiero pomnożenie ich przez $h \sim \sqrt{x}$ powoduje właściwą definicję wektorów własnych zgodną z postacią iloczynu skalarnego dla dwuwymiarowych funkcji we współrzędnych cylindrycznych $\int \psi \psi^* \rho d\rho$ (odpowiednio $\int \phi \phi^* x dx$).

3.2.2 Wyznaczanie wartości i wektorów własnych

Problem znajdowania wartości i wektorów własnych jest dla symetrycznych macierzy trójdiagonalnych dobrze rozpoznany zagadnieniem i może zostać rozwiązany na wiele sposobów.

Wartości własne macierzy $H'_{i,j}$ możemy wyznaczyć m.in. korzystając z algorytmu Martina-Deana [61, 62, 63], funkcjonującego w oparciu o metodę bisekcji i twierdzenie Sylwestera o bezwładności form kwadratowych. Do wyznaczania wektorów własnych ξ stosujemy natomiast stosunkowo uniwersalną metodę DWSZ² [64, 65, 63] (finalne funkcje falowe ϕ otrzymujemy korzystając z przekształcenia (3.18)). Obie metody zapewniają dobrą stabilność i dokładność dla rozpatrywanej postaci macierzy i są stosunkowo łatwe w implementacji i szybkie w działaniu.

3.2.3 Obliczanie całki Hartree

Występująca w wyrażeniach na samouzgodnione potencjały Hartree (3.2) całka Hartree we współrzędnych cylindrycznych przyjmuje postać:

$$\int \frac{|\psi(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' = \int_0^\infty d\rho' \rho' \int_0^{2\pi} d\varphi' \frac{|\phi_h(\rho')|^2}{\sqrt{\rho'^2 + \rho^2 - 2\rho'\rho \cos(\varphi - \varphi')}} \equiv I(\rho). \quad (3.22)$$

²od nazwisk autorów Dy, Wu, Spratlina [64] i Zhenga [65].

Opisany poniżej sposób numerycznego obliczania tej całki (który nie jest trywialny ze względu na występującą efektywnie w funkcji podcałkowej osobliwość typu logarytmicznego) został zaadoptowany z pracy [66].

Ze względu na symetrię cylindryczną funkcji falowej, całkowanie po współrzędnej kątowej przechodzi w zupełną całkę eliptyczną pierwszego rodzaju³ (ang. *complete elliptic integral of the first kind*) K i otrzymujemy wyrażenie:

$$I(\rho) = \int_0^\infty d\rho' \rho' \frac{4|\phi_h(\rho')|^2}{\rho' + \rho} K\left(\frac{4\rho'\rho}{(\rho' + \rho)^2}\right), \quad (3.23)$$

W obliczeniach numerycznych możemy przyjąć następującą aproksymację funkcji K (według [67]):

$$K(m) = (a_0 + a_1x' + a_2x'^2) - (b_0 + b_1x' + b_2x'^2) \ln x', \quad (3.24)$$

gdzie $x' = 1 - x$ oraz

$$\begin{aligned} a_0 &= 1,3862944 & b_0 &= 0,5 \\ a_1 &= 0,1119723 & b_1 &= 0,1212478 \\ a_2 &= 0,0725296 & b_2 &= 0,0288729 \end{aligned}$$

Występowanie w całce (3.23) osobliwości typu logarytmicznego nakłada konieczność zastosowania do jej obliczania specjalnie dostosowanej metody całkowania o zmiennym kroku⁴ – doskonale nadaje się do tego celu metoda logarytmicznie ważonych kwadratur (ang. *logarithmically weighted method*).

Korzystając z aproksymacji (3.24) całkę (3.22) możemy zapisać w postaci:

$$I(\rho) = \int_0^\infty d\rho' \left[G(\rho') + F(\rho') \ln \frac{(\rho' - \rho)^2}{(\rho' + \rho)^2} \right], \quad (3.25)$$

gdzie

$$\begin{aligned} G(\rho') &= \left[a_0 + a_1 \left(1 - \frac{4\rho'\rho}{(\rho' + \rho)^2} \right) + a_2 \left(1 - \frac{4\rho'\rho}{(\rho' + \rho)^2} \right)^2 \right] \rho' \frac{4|\phi_h(\rho')|^2}{\rho' + \rho}, \\ F(\rho') &= - \left[b_0 + b_1 \left(1 - \frac{4\rho'\rho}{(\rho' + \rho)^2} \right) + b_2 \left(1 - \frac{4\rho'\rho}{(\rho' + \rho)^2} \right)^2 \right] \rho' \frac{4|\phi_h(\rho')|^2}{\rho' + \rho}. \end{aligned}$$

Dla jednorodnej siatki dyskretnej o kroku s oraz liczbie kroków N równanie (3.25) możemy zapisać w postaci:

$$I(\rho) = \sum_{i=0}^{N-1} \int_0^s d\rho' \left[G(\rho' + is) + F(\rho' + is) \ln \frac{|\rho' - (\rho - is)|^2}{|\rho' + (\rho + is)|^2} \right]. \quad (3.26)$$

³korzystając z postaci Legendre'a[67] zupełnej całki eliptycznej pierwszego rodzaju

$K(m) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{\sqrt{1-m \sin^2 \vartheta}} d\vartheta$ oraz tożsamości trygonometrycznych.

⁴powszechnie stosowany w całkowaniu numerycznym stałokrokowy schemat Newtona-Cotesa oparty o regułę trapezoidalną bądź aproksymacje wyższego stopnia, nie da w tym wypadku dobrych rezultatów.

Zastępując teraz $F(\rho' + i s) \equiv F_i$ przez $F_i + (F_{i+1} - F_i)\frac{\rho'}{s}$ oraz postępując analogicznie dla G_i możemy przepisać równanie (3.25) w postaci

$$I(\rho) = \sum_{i=0}^{N-1} \left[|G_{i+1} + G_i| \frac{s}{2} + F_i A_i(\rho) + |F_{i+1} - F_i| C_i(\rho) \right], \quad (3.27)$$

gdzie

$$\begin{aligned} A_i(\rho) &= a(s - (\rho - i s)) - a(s + (\rho + i s)), \\ C_i(\rho) &= \frac{1}{s} [c(s - (\rho - i s)) - c(s + (\rho + i s))] - 2\rho, \end{aligned}$$

oraz

$$\begin{aligned} a(y) &= 2y \ln y + 2(s - y) \ln(s - y), \\ c(y) &= y(2s - y) \ln y + (s - y)^2 \ln(s - y). \end{aligned}$$

3.2.4 Implementacja algorytmów obliczeniowych

W Dodatku B zamieszczony został kod programu napisanego dla środowiska Wolfram Mathematica, za pomocą którego przeprowadzane były obliczenia numeryczne, których wyniki przedstawiono w niniejszym rozdziale.

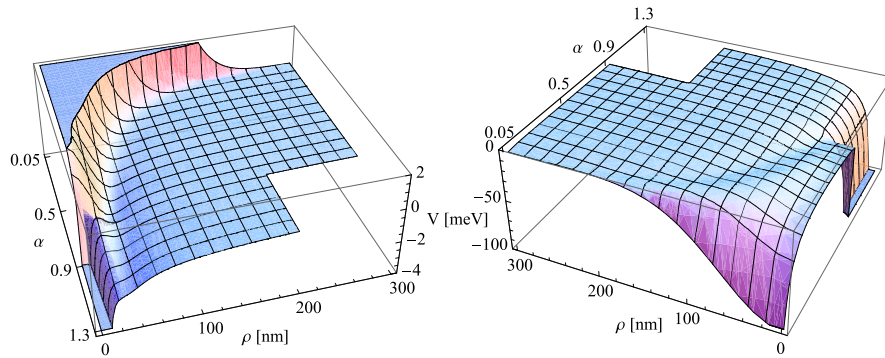
3.3 Wyniki obliczeń numerycznych dla kropek kwantowych II rodzaju

Rachunki numeryczne uwidocznily w ogólności przypuszczalne ilościowe przeszacowanie członu Hartree w podejściu analitycznym przedstawionym w podrozdziale 2.3, potwierdzając jednak w ujęciu jakościowym istnienie dwudolinowego potencjału efektywnego zdolnego do lokalizowania zarówno dziury jak i elektronu w każdej z jam, który to efekt okazuje się wyraźnie wzmocniony w przypadku niesymetrycznych głębokości jam gołego potencjału kropki kwantowej w paśmie przewodnictwa i walencyjnym, co może mieć miejsce dla niektórych rodzajów kropek samorosnących o odwróconych położeniach pasm oraz kropek zadanych dyfuzją nośników wywołaną wiązką lasera.

W przypadku symetrycznej głębokości jam potencjału gołej kropki (jak np. dla kropek zadanych polem elektrycznym), oddziaływanie kulombowskie między nośnikami nie jest na tyle silne, żeby w istotnym stopniu modyfikować lokalnie kształt efektywnych potencjałów Hartree. Wyjątek stanowią tu kropki na tyle małe, że przyciąganie kulombowskie dziury przez zlokalizowany w kropce elektron zaczyna być znacznie silniejsze od odpychającego potencjału gołej kropki i dziura „wpada” do centrum kropki, jeszcze bardziej wzmacniając lokalizację elektronu w centrum, co efektywnie skutkuje bardzo silną centralną lokalizacją

eksycytanu, podobnie jak w przypadku kropek I rodzaju (i całkowitym zanikiem charakterystycznego dla kropek II rodzaju dwudolinowego kształtu potencjału efektywnego).

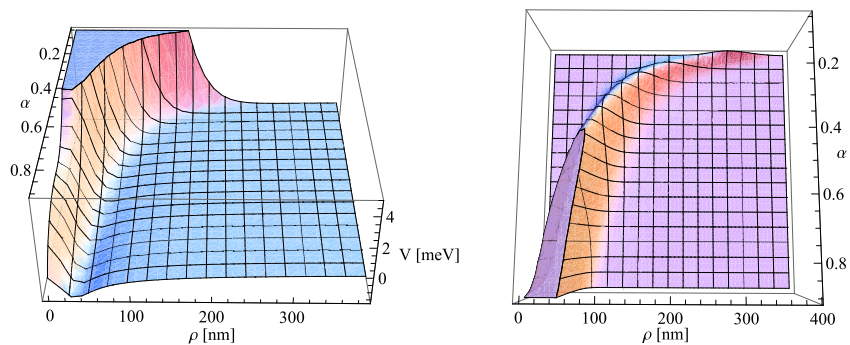
Na rysunku 3.1 przedstawiono przebiegi samouzgodnionych potencjałów Hartree elektronu i dziury dla szerokiego zakresu parametru rozmiarowego, uwidaczniającego moment przejścia dziury do centrum kropki. Krytyczny rozmiar kropki (promień gaussianu modelującego potencjał niezapełnionej kropki), dla którego następuje przejście dziury do centrum maleje wraz ze wzrostem jego krzywizny $\hbar\omega_0$. W analizowanych przez nas przypadkach przejście to następowało przy promieniu kropki⁵ wynoszącym około $L \sim 4\text{nm}$ dla $\hbar\omega_0 = 50\text{meV}$, $L \sim 14\text{nm}$ dla $\hbar\omega_0 = 10\text{meV}$, $L \sim 22\text{nm}$ dla $\hbar\omega_0 = 5\text{meV}$ i $L \sim 45\text{nm}$ dla $\hbar\omega_0 = 2\text{meV}$ (we wszystkich prezentowanych w niniejszym rozdziale obliczeniach przyjmowaliśmy parametry materiałowe GaAs – $m_e = 0.067m_0$, $m_h = 0.45m_0$, $\epsilon = 12.9$).



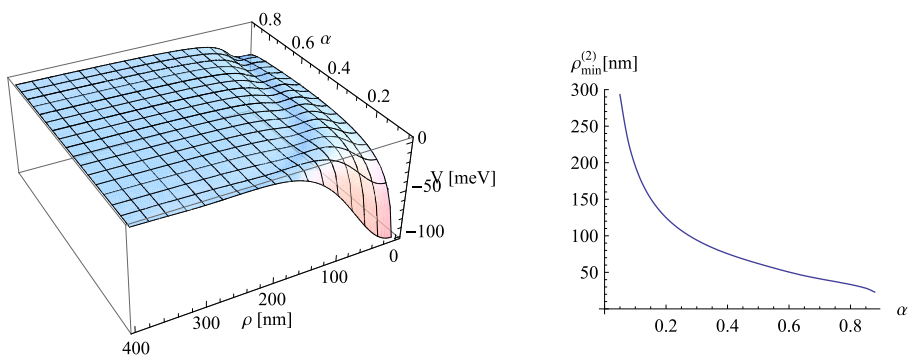
Rys. 3.1. Radialne profile samouzgodnionego potencjału Hartree dziury (z lewej) i elektronu (z prawej) w zależności od parametru rozmiaru kropki α (większe α - mniejsza kropka, zob. 2.1; $\hbar\omega_0 = 5\text{meV}$) w szerokim zakresie rozmiarów. Widoczny moment przejścia dziury do centrum w okolicach $\alpha \sim 0.9$ ($L \sim 20\text{nm}$).

W ogólnym przypadku dla kropek kwantowych II rodzaju mamy jednak do czynienia z relatywnie słabą lokalizacją dziury w pierścieniu wokół centrum kropki kwantowej (rys. 3.2) i równie słabą modyfikacją efektywnego potencjału elektronu (rys. 3.3), który zazwyczaj pozostaje zlokalizowany w centrum kropki.

⁵L jest promieniem gaussianu odpowiadającym definicji z rys. 2.1

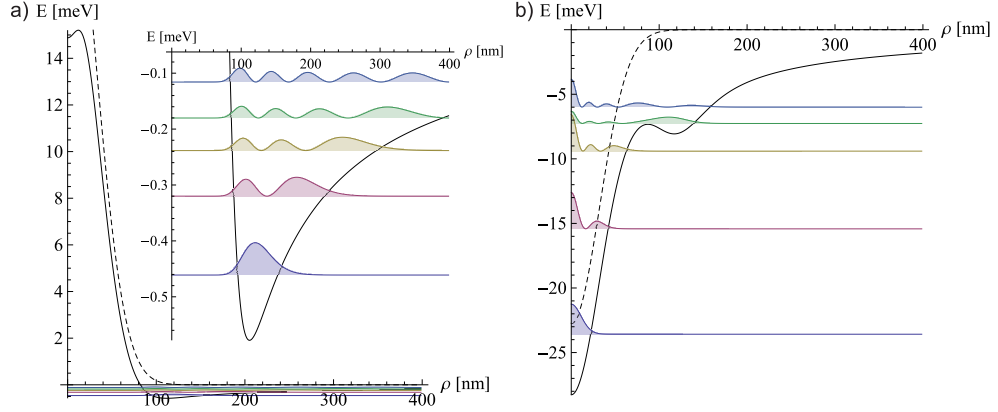


Rys. 3.2. Radialny profil samouzgodnionego potencjału Hartree (z lewej) oraz odpowiadającej gęstości prawdopodobieństwa stanu podstawowego dziury (z prawej) w zależności od parametru rozmiaru kropki α (większe α - mniejsza kropka, zob. rys. 2.1; $\hbar\omega_0 = 5\text{meV}$).

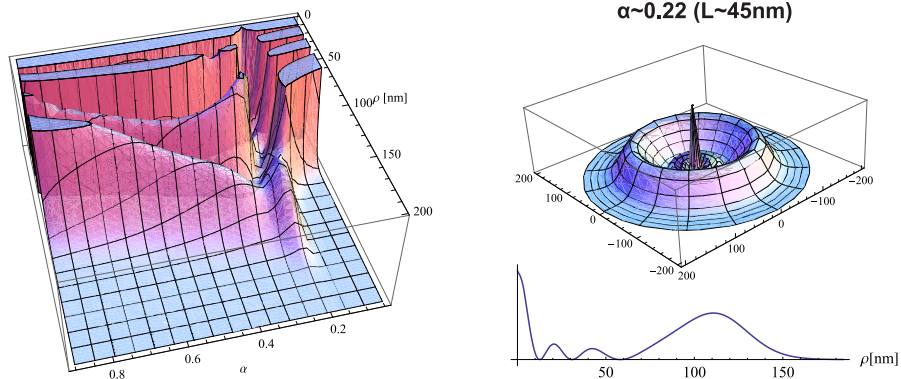


Rys. 3.3. Radialny profil samouzgodnionego potencjału Hartree elektronu w zależności od parametru rozmiaru kropki α (z lewej) oraz rozmiarowa zależność położenia drugiej doliny potencjału Hartree elektronu (z prawej); większe α - mniejsza kropka, zob. rys. 2.1; $\hbar\omega_0 = 5\text{meV}$.

Dla pewnych zakresów parametrów druga dolina potencjału Hartree elektronu zaczyna jednak być wyraźnie zaznaczona i zdolna do lokalizowania w obrębie swojej przestrzeni elektronu w wyższych stanach wzbudzonych (rys. 3.5 i 3.4).

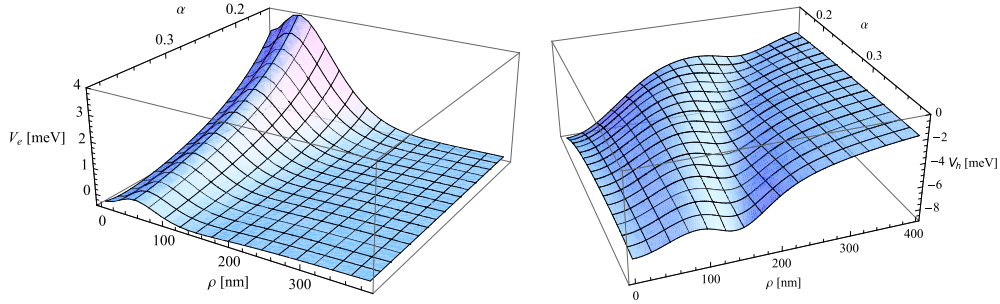


Rys. 3.4. Pierwsze 5 stanów dziury ($n_h = 1 \dots 5$) w samouzgodnionym potencjale Hartree dziury (wstawka pokazuje zbliżenie na ujemną część potencjału) (a) i pierwsze 5 stanów elektronu ($n_e = 1 \dots 5$) w samouzgodnionym potencjale Hartree elektronu (dziura w stanie podstawowym $n_h = 1$) (b) dla $\alpha \sim 0.22$ (promień kropki $L \sim 45\text{nm}$, $\hbar\omega_0 = 5\text{meV}$); linią przerywaną zaznaczono kształty gołych potencjałów kropki (dla kropki nieobsadzonej przez elektron/dziurę).

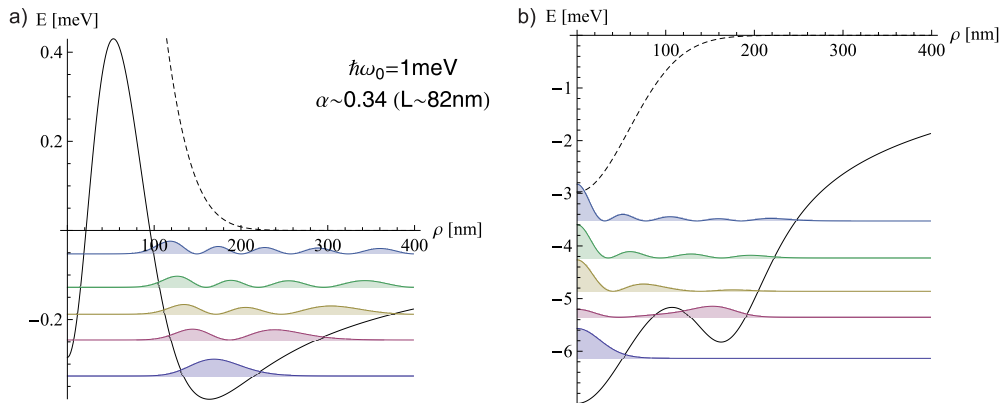


Rys. 3.5. Radialny profil gęstości prawdopodobieństwa dla 4-tego stanu elektronu ($n_e = 4$) w zależności od parametru rozmiaru kropki α (z lewej) i gęstość prawdopodobieństwa dla $\alpha \sim 0.22$ (promień kropki $L \sim 45\text{nm}$, $\hbar\omega_0 = 5\text{meV}$) uwidaczniające lokalizację elektronu w okolicy drugiej doliny potencjału Hartree (z prawej) ($\hbar\omega_0 = 5\text{meV}$, dziura w stanie podstawowym $n_h = 1$).

W omawianym przypadku równej głębokości potencjału wiążącego i antywiążącego niezapełnionej kropki, druga dolina staje się jeszcze bardziej wyraźna dla kropek bardzo płtykich energetycznie w stosunku do rozmiaru bocznej kropki (tj. o małej krzywiznie $\hbar\omega_0$) – rys. 3.6. W tym wypadku możliwe jest lokalizowanie w drugiej dolinie już pierwszego stanu wzbudzonego elektronu (rys. 3.7).

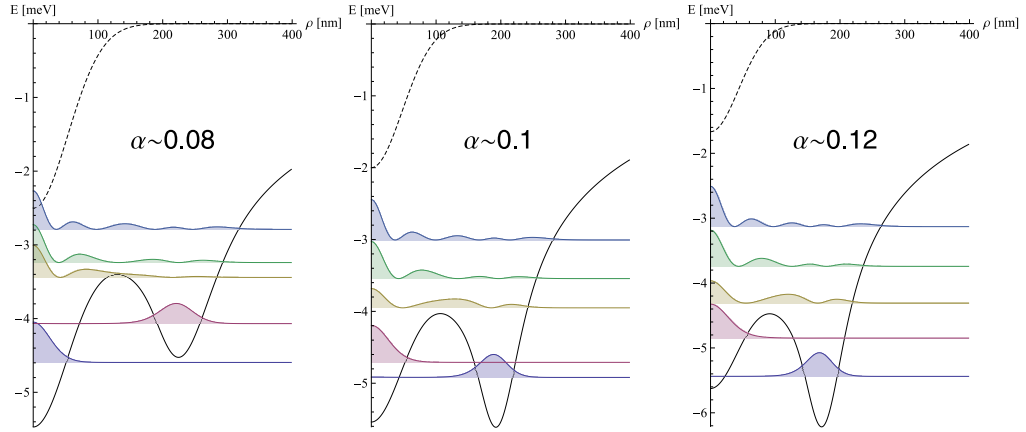


Rys. 3.6. Radialne profile potencjału efektywnego Hartree dziury (z lewej) i elektronu (z prawej) w zależności od parametru rozmiaru α w przypadku płtykiej kropki kwantowej II rodzaju ($\hbar\omega_0 = 1\text{meV}$).



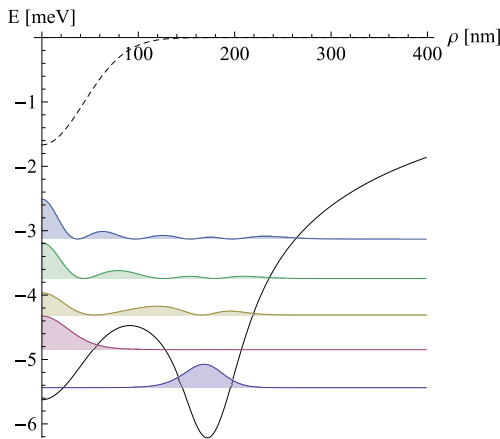
Rys. 3.7. Pierwsze 5 stanów dziury ($n_h = 1 \dots 5$) w samouzgodnionym potencjale Hartree dziury (a) i pierwsze 5 stanów elektronu ($n_e = 1 \dots 5$) w samouzgodnionym potencjale Hartree elektronu (dziura w stanie podstawowym $n_h = 1$) (b) w przypadku płtykiej kropki kwantowej II rodzaju ($\hbar\omega_0 = 1\text{meV}$) dla kropki o rozmiarze $\alpha \sim 0.34$ (promień kropki $L \sim 82\text{nm}$); linią przerywaną zaznaczono kształty gołych potencjałów kropki (dla kropki nieobsadzonej przez elektron/dziurę).

Druga dolina nabiera także istotnego znaczenia w przypadku nierównych głębokości studni wiążącej i antywiążącej potencjału niezapełnionej kropki. W kropkach II rodzaju typu przyciągającego dla elektronu wyraźne uwidocznienie drugiej doliny pojawia się w przypadku płytszej studni w paśmie przewodnictwa od studni odpychającej w paśmie walencyjnym. Na rys. 3.8 zilustrowano taki przypadek



Rys. 3.8. Dwudolinowy kształt potencjału Hartree dziury w przypadku kropek drugiego rodzaju o dużej asymetrii głębokości jam gołych potencjałów wiążących pasma przewodnictwa i walencyjnego ($V_{0e}/V_{0h} = 1/25$) dla kilku rozmiarów kropki zadanych parametrem α ; w zależności od rozmiaru kropki stan podstawowy elektronu oraz pierwszy stan wzbudzony może lokalizować się w dolinie centralnej lub bocznej; $\hbar\omega_0 = 5$.

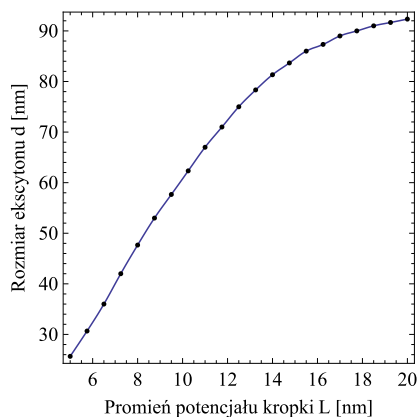
dla jamy potencjału pasma przewodnictwa 25-krotnie płytszej od jamy pasma walencyjnego ($V_{0e}/V_{0h} = 1/25$) dla $\hbar\omega_0 = 5$. W tym przypadku możliwa jest sytuacja w której dwa pierwsze stany elektronu (stan podstawowy i pierwszy stan wzbudzony) zlokalizowane są w całości w dwóch dolinach efektywnego potencjału Hartree (w zależności od rozmiaru kropki, stan podstawowy znajduje się w centralnej bądź bocznej dolinie, możliwy jest także zdegenerowany stan podstawowy w obydwu dolinach). Dla bardzo płytkich kropek ($\hbar\omega_0 \sim 1$) omawiany efekt jest już zauważalny nawet w przypadku $V_{0e}/V_{0h} = 1/2$ (rys. 3.9).



Rys. 3.9. Dwudolinowy kształt potencjału Hartree dziury w przypadku płytkich ($\hbar\omega_0 = 1$) kropek II rodzaju o relatywnie asymetrii głębokości jam gołych potencjałów wiążących pasma przewodnictwa i walencyjnego ($V_{0e}/V_{0h} = 1/2$); rozmiar kropki $\alpha \sim 0.3$; w zależności od rozmiaru kropki stan podstawowy elektronu oraz pierwszy stan wzbudzony może lokalizować się w dolinie centralnej lub bocznej.

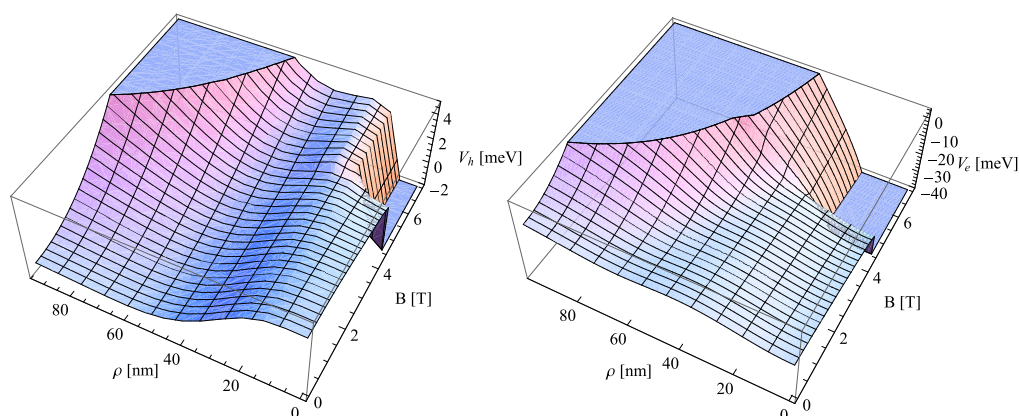
Ze względu na charakterystyczną toroidalną lokalizację dziury w pierścieniu wokół centrum kropki, rozmiary przestrzenne ekscytonu zlokalizowanego w krop-

ce kwantowej II rodzaju są generalnie znacznie większe od rozmiarów jamy gołego potencjału kropki, i jednocześnie znacznie większe od rozmiarów ekscytonu związanego na kropce I rodzaju o podobnej charakterystyce rozmiarowej jam wiążących. Na rysunku 3.10 przedstawiono przykładową zależność rozmiaru ekscytonu od rozmiaru kropki dla kropek relatywnie małych i głębokich ($\hbar\omega_0 = 50meV$).



Rys. 3.10. Zależność rozmiaru ekscytonu (zasięg funkcji gęstości prawdopodobieństwa dla dziury) od rozmiaru kropki (promień L gaussianu modelującego potencjał wiążący kropki) dla kropek relatywnie małych i głębokich ($\hbar\omega_0 = 50$).

Włączenie zewnętrznego pola magnetycznego skierowanego prostopadle do płaszczyzny kropki dodaje do samouzgodnionych potencjałów Hartree obydwu cząstek człon kwadratowy $\frac{e^2 B^2}{8m_e(\hbar)}\rho^2$ (zob. podrozdział 3.1), co powoduje ściąganie zarówno elektronu jak i dziury w kierunku centrum kropki i wzmocnienie lokalizacji nośników w centralnych jamach przy jednoczesnym znacznym osłabieniu lokalizacji w jamach bocznych (rys. 3.11). W efekcie, w przypadku rozmiarów kropek, dla których w zerowym polu magnetycznym dziura lokalizowana jest w pierścieniu wokół elektronu, w obecności tego pola dla pewnej krytycznej jego



Rys. 3.11. Zależność kształtu radialnego profilu samouzgodnionego potencjału Hartree dziury (z lewej) i elektronu (z prawej) dla kropki kwantowej II rodzaju od indukcji przyłożonego poprzecznie do płaszczyzny kropki zewnętrznego pola magnetycznego B. Promień kropki $L \sim 30nm$ ($\hbar\omega_0 = 5meV$). Widoczny moment przejścia dziury do centralnej jamy w okolicy $B \sim 4.55 - 4.9T$.

wartości następuje przejście dziury do centrum kropki. Podobnie krytyczny rozmiar kropki, przy którym dziura przechodzi do centralnej jamy, ulega wraz z rosnącym polem magnetycznym przesunięciu w kierunku większych rozmiarów. Dokładniejsze zbadanie wpływu pola magnetycznego na zachowanie stanów ekscytonowych wymaga jednak przeprowadzenia bardziej szczegółowej analizy, która wykracza poza ramy niniejszej rozprawy, i będzie rozwijane w ramach dalszych badań.

3.4 Uwagi odnośnie podejścia numerycznego

W odniesieniu do przeprowadzonych analiz należy mieć na uwadze, że uwzględnienie oddziaływania pary e-h zgodnie ze schematem Hartree (także w ramach podejścia numerycznego) jest jednak przybliżeniem i jego dokładność jest niepewna dla małych liczb nośników w kropkach (w tym przypadku dwóch) i dodatkowo przy niekorzystnych, z punktu widzenia tego przybliżenia, relacjach energii kinetycznej i energii oddziaływania. W kropkach kwantowych, ze względu na skalę lokalizacji wyrażającą się w nanometrach, energia oddziaływania nie jest mała w stosunku do energii kinetycznej i zatem wszelkie perturbacyjne i przybliżone metody uwzględnienia oddziaływania tracą na dokładności. Nawet w przypadku atomów, gdzie oddziaływanie było znacznie mniej istotne, przybliżenie Hartree nie było precyzyjne (możliwe niedokładności oceniane były na 1-5%).

Dlatego też i w odniesieniu do kropek kwantowych wyniki należy raczej traktować jako jakościowe, zwłaszcza, że w przypadku kropek zarówno II jak i I rodzaju występują znaczne poprawki widma energetycznego i stanów zlokalizowanych nośników nawet w zakresie do 10%, wywołane przez hybrydyzacyjne efekty między lokalnymi stanami i wzbudzeniami kolektywnymi otoczenia (głównie fononami, zwłaszcza z fononami optycznymi w polarnych i słabo polarnych materiałach, jak np. GaAs). W dalszej części pracy przedstawione zostaną te poprawki, które wiążą się także z dekoherencją zlokalizowanych stanów. Zostaną one ocenione zarówno co do rzędu wielkości jak i charakterystyk czasowych kinetyki modyfikacji hybrydyzacyjnych stanów elektronów, dziur i ekscytonów w kropkach kwantowych, także II rodzaju.

W związku ze skalą poprawek wprowadzanych przez omawiane efekty można oczekiwać modyfikacji prostego obrazu Hartree zwłaszcza w przypadku niewielkich poprawek uzyskiwanych w ramach tego obrazu czy subtelnej konkurencji stanów. Takie niewielkie poprawki w ramach przybliżenia Hartree odnosić się mogą do efektywnych potencjałów elektronu i dziury wyższych rzędów kolejnych przybliżeń i ich ewentualnej wielodolinowej struktury (jeśli niewyraźnej i płytkiej), która może zostać zamazana przez hybrydyzacyjne efekty, a także z drugiej strony, mogła być wynikiem niedokładności samego modelu kolejnych przybliżeń i podejścia Hartree (szczególnie w ujęciu analitycznym). Należy tu podkre-

ślić, że przybliżenie Hartree zakłada funkcję falową ekscytonu w postaci iloczynu jednocząstkowych stanów, dopasowanych optymalnie wg wariacyjnej zasady całej metody. W przypadku jednak, gdy dwucząstkowa funkcja falowa (w naszym przypadku e-h) może mieć postać nieseparowalną w istotny sposób – tzn. taką, dla której przybliżenie iloczynowe jest obarczone dużym błędem, to wtedy spodziewać się można mylnych wyników metody Hartree. W takim przypadku korelacyjne efekty (odstępstwa od separowalnej funkcji falowej pary e-h) mogą znacząco zmienić ilościowe wyniki⁶. Dlatego wydaje się uzasadnione formułowanie wniosków w oparciu o efektywne wiążące potencjały elektronu i dziury w możliwie najniższym rzędzie kolejnych przybliżeń, traktując dalsze poprawki jako ilustracje i możliwość porównania modeli.

⁶Sytuacja taka ma miejsce w przypadku swobodnego ekscytonu, kiedy oszacowanie energii wiązania metodą Hartree jest prawie dwukrotnie niższe niż dokładny wynik.

Rozdział 4

Przykłady wykorzystania kropek kwantowych II rodzaju

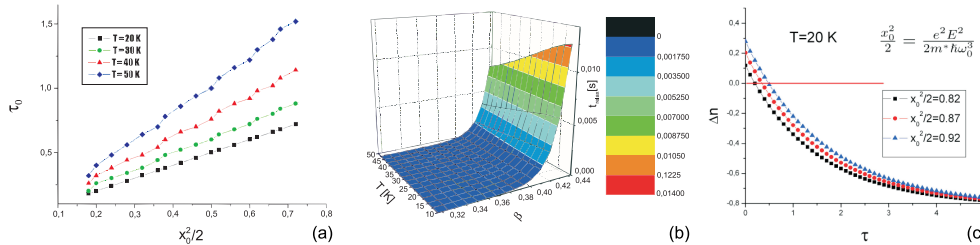
4.1 Nowe możliwości realizacji urządzeń optoelektronicznych

Szczególnie interesującą cechą kropek kwantowych II rodzaju tworzonych w studniach kwantowych przez ogniskowanie elektrostatyczne przy pomocy odpowiednio ukształtowanych metalowych elektrod, jest możliwość tworzenia równocześnie całych matryc takich kropek i regulowanie struktury przy pomocy przyłożonego napięcia. Pozwala to na zupełnie nowe realizacje w porównaniu z tradycyjnymi technikami wytwarzania stabilnych struktur materiałowych, jak w przypadku kropek samorosnących bądź wytrawianych. Możliwość zmiany parametrów kropek, w tym włączanie lub wyłączanie całych ich matryc nie znajduje odpowiednika w trwałych materiałowych rozwiązaniach nano-technologicznych i oferuje zupełnie nowe możliwości. Szybkie włączanie i wyłączanie matrycy kropek kwantowych w studni kwantowej może być wykorzystane do uzyskiwania inwersji obsadzeń kropek, przy warunku nieadiabatycznego ich przełączania. Prowadzić to może w szczególności do zaprojektowania nowego typu lasera podczerwieni.

Projekt taki został przeanalizowany szczegółowo w pracach [68, 69] i opatentowany [70]. Wykazano możliwość uzyskania zysku optycznego przy nieadiabatycznym szybkim przełączaniu kropek II rodzaju tworzących matrycę w studni kwantowej Ga(Al)As w zakresie wymuszonej emisji w widmie podczerwonym odpowiadającym energetycznym odległościom między poziomami w kropkach o nanometrowych rozmiarach. Praktyczna realizacja tego urządzenia ograniczana jest jednak przez trudności techniczne z dostatecznie szybkim przełączaniem napięcia na elektrodach, z uwagi na ograniczenia LC i inne ograniczenia właściwe dla

technik impulsowych¹. Niemniej jednak wykazano możliwość praktycznej realizacji tego lasera przez zmniejszenie jego rozmiarów do mikrometrowych wymiarów matrycy o obniżonej pojemności elektrycznej.

Innym przykładem zastosowania matrycy kropek kwantowych o modelowanych głębokich jamach potencjału jest zaprojektowanie [71, 72] nowego kaskadowego typu lasera podczerwieni. W analizie projektu wykorzystano kwazi ekwidystantność widma potencjału parabolicznego modelującego głębokie gaussiany kropek II rodzaju. Prawdopodobieństwa przejść optycznych dla nieadiabaticznego wymuszenia w postaci poprzecznego (*in plane*) pola elektrycznego szybko przełączanego obliczyć można z przekrycia odpowiednich niezaburzonych i zaburzonych funkcji falowych. Wzajemnie sprzężoną dynamikę układu elektronów w matrycy kropek i fotonów ujmuje zlinearyzowany układ równań – uogólnienie opisu dwupoziomowego układu laserującego. Rozwiązanie uzyskać można w analitycznej postaci przy kontrolowanych przybliżeniach. Kaskadowy charakter emisji z ekwidystantnego energetycznie szeregu stanów dla parabolicznego potencjału zwiększa zysk optyczny. Na rys. 4.1 przedstawiono obliczone charakterystyki dynamiki inwersji obsadzeń: bezwymiarowy parametr określający czas osiągnięcia zerowej wartości inwersji obsadzeń w funkcji natężenia pola pompującego dla różnych temperatur (a), czas termalizacji fononowej górnego wzbudzonego stanu dla różnych temperatur (b), zależność inwersji obsadzeń od parametru czasowego z rys. (a) dla ustalonej temperatury i różnych natężeń pola pompującego (c).



Rys. 4.1. Bezwymiarowy parametr określający czas osiągnięcia zerowej wartości inwersji obsadzeń w funkcji natężenia pola pompującego dla różnych temperatur (a), czas termalizacji fononowej górnego wzbudzonego stanu dla różnych temperatur (b), zależność inwersji obsadzeń od parametru czasowego z rys. (a) dla ustalonej temperatury i różnych natężeń pola pompującego.

Innym rozwiązaniem wykorzystującym możliwości matryc kropek kwantowych II rodzaju tworzonych ogniskowaniem elektrostatycznym jest źródło koherentnych spinowo elektronów. Wygodnie jest tu zastosować materiał DMS² dla studni kwantowej, w której wytworzyć należy matrycę (łańcuch kropek) o nie-

¹szybkie przełączanie ograniczone jest przez niuniknione charakterystyki LC układu, i osiągnięcie wymaganej częstotliwości przełączania, $\sim 1/\text{ps}$, wymagałoby zastosowania ultraszybkich technik falowodowych lub diód lawinowych.

²*diluted magnetic semiconductor*, półprzewodnik półmagnetyczny.

wielkiej głębokości, mogących pomieścić tylko jeden elektron – bez obecności pola magnetycznego o dowolnej wtedy orientacji spinu. Przejście do stanu ferromagnetycznego DMS o gigantycznej wartości pola Weissa, powoduje silne rozszczepienie dwóch orientacji spinu elektronu na kierunku magnetyzacji. Łatwo osiągnąć sytuację, że tylko elektrony ze spinem zgodnym z magnetyzacją będą obsadzały kropki (spin odwrotny prowadzić będzie do niezwiązanego stanu). Przez przyłożenie odpowiedniego bocznego napięcia wywołać można tunelowanie związanych i koherentnych spinowo elektronów w poprzek układu, co prowadzi do koherentnego spinowo źródła elektronów. Ważne jest zauważyć tutaj, że dokoherencja (defazowanie) spinów wywoływana przez fale spinowe w DMS (jak zostało to opisane w rozdziale 6 o dekoherencji spinu w układach magnetycznych) jest szkodliwym czynnikiem, który jednak może zostać skutecznie wymrożony w niskich temperaturach, wobec wykazanej specyfiki defazowania spinu przez magnony, zupełnie odmiennej od nieusuwalnego nawet w $T = 0K$ defazowania ładunków przez fonony [29].

Opisane powyżej przykłady nowatorskiego zastosowania kropek kwantowych II rodzaju wskazują na duże możliwości tych układów i spodziewać się można ich coraz szerszego praktycznego wykorzystania, w miarę dalszego rozwoju technik i precyzji wykonywania odpowiednich nanometrowych rozmiarów elektrod metalowych (obecnie wytwarzanych głównie metodami litografii jonowej lub elektronowej).

4.2 Efekt Aharonowa-Bohma w kropkach kwantowych II rodzaju

Interesującym aspektem kropek kwantowych II rodzaju jest opisana we wcześniejszych rozdziałach struktura ekscytonów, w których jeden z nośników ma jednocząstkową funkcję falową w przybliżeniu toroidalnego kształtu. W takim przypadku można mówić o kwantowaniu strumienia pola magnetycznego przez ten zamknięty kształt gęstości ładunku. Obserwacja odpowiednich oscylacji typu Aharonova-Bohma [45] wraz ze wzrostem pola jest uznawana za główną charakterystykę kropek kwantowych II rodzaju, pozwalającą na odróżnienie ich od kropek I rodzaju, dla których kwantowanie strumienia pola magnetycznego nie występuje. Efekt kwantowania strumienia pola przez zamkniętą strukturę funkcji falowej pojedynczej cząstki ma charakter podstawowy o dużym znaczeniu. Kwantowanie strumienia pola magnetycznego odnosiło się bowiem zwykle do sytuacji kwaziklasycznej dynamiki cyklicznej pakietów falowych (dynamicznej superpozycji stanów stacjonarnych), a nie do pojedynczego stanu stacjonarnego cząstki, jak w przypadku toroidalnego stanu dziury w kropce II rodzaju. To z pewnością nowa jakość w odniesieniu do efektu Aharonova-Bohma o być może nowych także i konsekwencjach. Interesującym wydaje się tu np. pytanie, w jaki sposób

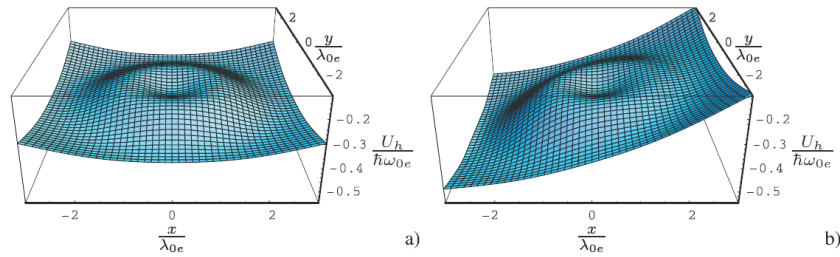
następuje uwalnianie skwantowanego strumienia przy deformacji i ściągnięciu toroidalnej funkcji falowej nośnika do stanu nietoroidalnego, co można osiągnąć (zgodnie z przedstawioną analizą) manipulując parametrami kropki II rodzaju, zwłaszcza ogniskowanej elektrostatycznie. Można tu zadać pytanie, na ile stabilny jest kwant strumienia pola magnetycznego i czy może, w związku z tym, wystąpić konieczność przechwycenia go przez drugą cząstkę pary ekscytynu, co wydaje się możliwe w ramach analizy struktury ekscytynu w zmiennych rozmiarowo kropkach gaussowskich.

4.3 Kropki II rodzaju w bocznym polu elektrycznym

Kropki kwantowe II rodzaju mogą być wykorzystywane do koherentnej inżynierii stanów kwantowych (w dodatku A przedstawiony jest zarys zagadnień związanych z kwantowym przetwarzaniem informacji [*Quantum Information Processing, QIP*]), kiedy koherentna ewolucja stanów kwantowych odgrywa pierwszoplanową rolę – z kolei kropki kwantowe oferują możliwości tworzenia i sterowania stanami kwantowymi w stosunkowo dostępnym technicznie zakresie (odnośnie pól sterujących, jak i dobrze i szeroko opanowanych technik wytwarzania kropek, w bliskim związku z szeroko stosowanymi technikami standardowej technologii klasycznej informatyki, głównie litografii). Główną przeszkodą jest jednak dekoherencja – silna w przypadku kropek kwantowych, dla których wciąż poszukiwane są optymalne warunki sterowania stanami pojedynczych elektronów, dziur, ekscytynów i związanych z nimi pojedynczych fotonów. Koherentne efekty w kropkach są bardzo czułe na rozmiary tych nanostruktur (jak zostanie to zademonstrowane w kolejnych rozdziałach). Kropki I rodzaju są zwykle ograniczone warunkami technologii wytwarzania i mimo znacznej elastyczności geometrii i rozmiarów nie mogą w tym względzie dorównać kropkom II rodzaju. Możliwość modelowania potencjałów wiążących kropki definiowanych elektrostatycznym ogniskowaniem powoduje, że w bardziej doskonałym stopniu kropki takie mogą być zbliżone do idealnych kropek parabolicznych (dla dostatecznie głębokich kropek gaussowskich lub podobnych). W szczególności dla tylko elektronowych kropek fakt odpychania nośników przeciwnego znaku może nie mieć istotnego znaczenia i stwarzać to może realną perspektywę realizacji w praktyce efektów parabolicznego potencjału wiążącego.

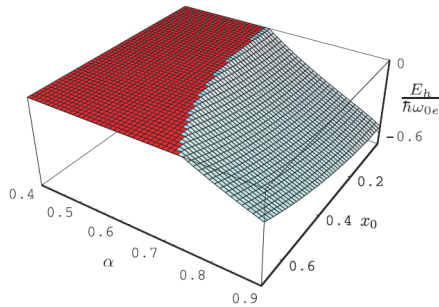
Do takich, specjalnych dla parabolicznego potencjału, efektów zaliczyć można zachowanie parabolicznej kropki w poprzecznym polu elektrycznym. Jak zostało pokazane w pracy [73] dla parabolicznej kropki w studni 2D (w praktyce, głębokiej kropki zadanej ogniskowaniem elektrostatycznym w kwazi-2D studni kwantowej) z prostopadłym do kropki polem magnetycznym i poprzecznym (w płaszczyźnie kropki) polem elektrycznym, można usunąć formalnie elektryczne pole poprzeczne i dokonać przesunięcia współrzędnych i zmianę cechowania po-

tencjału pola magnetycznego. Możliwość usunięcia pola porzecznego w przypadku parabolicznego potencjału kropki poprzez odpowiednie cechowanie pola magnetycznego pozwala zauważyć znikanie niektórych efektów wywoływanych przez pole porzeczne, w szczególności tych związanych z niezmienniczością cechowania. Takie nieoczekiwane pozornie efekty mogą być dobrym miernikiem eksperymentalnym paraboliczności potencjału wiążącego i stopnia niedokładności parabolicznego przybliżenia realnej struktury. Proponowane w [73] eksperyment z bezpośrednim pomiarem momentu pędu jest tego przykładem, gdyż opisywany tu związek cechowania pola magnetycznego i bocznego pola elektrycznego nie obowiązuje dla innych niż paraboliczny kształtów potencjału lokalizującego.



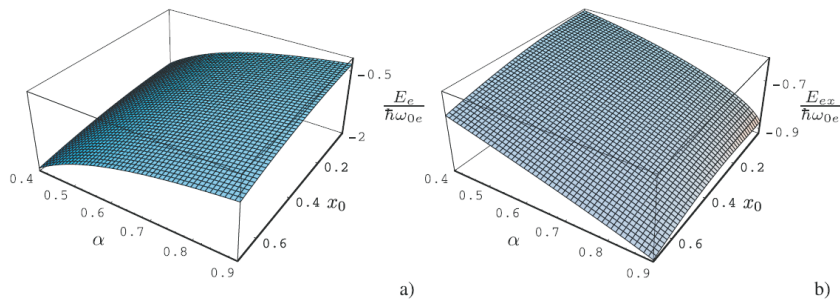
Rys. 4.2. Potencjał Hartree dla dziury w kropce kwantowej II rodzaju (w studni Ga(Al)As, krzywizna 5.4 meV, $\alpha = 0.7$) bez pola bocznego (a) i przy bocznym polu elektrycznym (b) wzdłuż osi x o natężeniu 140 kV/cm; pole boczne likwiduje dwudolinową strukturę potencjału.

Innym aspektem bocznego pola elektrycznego w gaussowskich kropkach II rodzaju jest możliwość dodatkowego sterowania (deformacji niecylicydrycznej) stanami ekscytonów i trionów. W wyniku uzyskać można dużo bardziej złożoną strukturę ekscytonów – szczególnie łatwo badać te stany numerycznie wobec trudności analitycznych związanych z utratą symetrii cylindrycznej. Interesujące wydają się możliwości użycia dodatkowego pola w płaszczyźnie w przypadku całych matryc kropek II rodzaju (zadawanych ogniskowaniem elektrostatycznym) i w ten sposób uzyskania możliwości sterowania tunelowaniem nośników między kropkami matrycy. Może być to szczególnie przydatne dla realizacji wspomnianego wyżej koherentnego źródła spolaryzowanych spinowo elektronów.



Rys. 4.3. Energia dziury w przybliżeniu Hartree w kompleksie ekscytonowym w kropce II rodzaju (krzywizna 5.4 meV) w zależności od wielkości kropki w bocznym polu elektrycznym o natężeniu proporcjonalnym do x_0 [74] – zaciemniony obszar odpowiada rozpadowi ekscytonu.

W pracy [74] zbadano wpływ bocznego pola elektrycznego o natężeniu ~ 100 kV/cm na stany ekscytonowe w kropce kwantowej II rodzaju dla parametrów materiałowych GaAs. Analiza została przeprowadzona w ramach przybliżenia Hartree. Wykazano, że pole 140 kV/cm powoduje usunięcie dwudolinowej struktury potencjału Hartree dla elektronów (dla GaAs, $\alpha \sim 0.7$ oraz $\hbar\omega_0 = 5$ meV) i zatem zmianę struktury ekscytonu (przykładowe zachowanie potencjału Hartree dla dziury w zależności od bocznego pola elektrycznego przedstawiono na rys. 4.2). Dla słabszych pól oceniono przesunięcia energetyczne widma ekscytonowego (proporcjonalne do kwadratu natężenia pola), a dla silniejszych zbadano możliwość delokalizacji dziury w kropce II rodzaju, czyli niszczenie zlokalizowanego w niej ekscytonu (rys. 4.3). Na rysunku 4.4 przedstawiona jest zależność energii elektronu (a) związanego w kropce i ekscytonu (b) (w przybliżeniu Hartree), w funkcji rozmiaru kropki i natężenia bocznego pola $\sim x_0$. W obszarze zaciemnionym na rys. 4.3 dziura nie jest związana (ekscyton nie jest zlokalizowany) – co odpowiada rozpadowi ekscytonu zlokalizowanego na kropce kwantowej II rodzaju.



Rys. 4.4. Energia elektronu (a) i ekscytonu (b) w przybliżeniu Hartree w kompleksie ekscytonowym w kropce II rodzaju (krzywizna 5.4 meV) w zależności od wielkości kropki w bocznym polu elektrycznym o natężeniu proporcjonalnym do x_0 [74].

We wspomnianej wyżej propozycji lasera podczerwonego opartego na inwersji obsadzeń w parabolicznych kropkach II rodzaju również wykorzystuje się wpływ bocznego pola elektrycznego [71, 72]. Szybkie przełączanie tego pola prowadzi do inwersji obsadzeń w parabolicznej kropce na skutek nieadiabatyckiego obsadzania zmieniających przez boczne pole stanów kwantowych. Jak wykazano [71], zysk optyczny osiągnąć można przy dostępnej technicznie częstości przełączania, regulowanej wielkością natężenia pola pompującego (i zatem wielkością nieadiabatyckiego przeskoku energii stanów), co stwarza realne perspektywy realizacji tego projektu. Podkreślić tu należy dodatkowy korzystny udział parabolicznego potencjału wiążącego kropki, który umożliwia wykorzystanie wzmocnienia efektywności promienistej w wyniku kaskadowego efektu dla ekwidystantnego widma energetycznego potencjału parabolicznego (w przypadku idealnej nieograniczo-

nej paraboloidy wykorzystano w pracy oryginalny sposób dokładnego rozwiązania zagadnienia Cauchy'ego dla nieskończonego łańcucha sprzężonych równań różniczkowych opisujących kinetykę układu elektronowo-fotonowego, co stanowi dodatkowy przyczynek teoretyczny w odniesieniu do parabolicznego potencjału wiązania [71]).

Rozdział 5

Dekoherencja fazowa orbitalnych stopni swobody w nanostrukturach

W celu odróżnienia spinowej i orbitalnej części funkcji falowej opisującej stan cząstki, w tym też cząstki zlokalizowanej w kropce kwantowej lub w innej nanostrukturze półprzewodnikowej, posługiwać się można określeniami orbitalnych oraz spinowych stopni swobody. Ma to wyjątkowo wyraźne uzasadnienie w przypadku, gdy sprzężenia spin-orbita nie są znaczne i separacja funkcji falowej w obu przestrzeniach jest dobrym zerowym przybliżeniem, wystarczającym do uchwycenia wielu prawidłowości. Do takich prawidłowości zaliczyć można efekty dekoherencji oddzielnie orbitalnych i spinowych stopni swobody stanów opisujących wzbudzenia w kropkach, takich jak elektrony, dziury czy ekscytony, wywoływanej przez pasmowe wzbudzenia w otoczeniu krystalicznym kropki (fonony, magnony czy elektrony pasmowe).

Ze względu na fakt, że orbitalna część funkcji falowej elektronu lub dziury zlokalizowanych w kropce kwantowej określa (poprzez kwadrat modułu) gęstość prawdopodobieństwa rozkładu ładunku elektrycznego tych cząstek, orbitalne stopnie swobody nazywane są też często ładunkowymi stopniami swobody. Takie wzbudzenia ładunkowe w kropkach kwantowych można realizować przy pomocy światła o odpowiedniej energii fotonów. Wzbudzenia elektronów i dziur odpowiadają zakresowi dalekiej podczerwieni (zakres energii wiązania w kropkach w typowej skali meV). Wzbudzenie ekscytonowe zwykle odpowiada przetrzuceniu elektronu z pasma walencyjnego do pasma przewodnictwa w materiale wokół kropki, co wymaga pokonania przerwy wzbronionej półprzewodnika (w zakresie widzialnym lub w bliskiej podczerwieni, na skali eV odpowiadającej przerwie wzbronionej). W wyniku takiego wzbudzenia powstaje para elektron-dziura (od-

powiednio w pasmie przewodnictwa i walencyjnym) i w kropkach kwantowych pierwszego rodzaju obie te cząstki są lokalizowane przez potencjał wiążący kropki, zmniejszając energię w stosunku do niezwiązanego ekscytonu w skali meV energii lokalizacji w kropce. W kropkach drugiego rodzaju wiązanie ekscytonów także może wystąpić, ale w tym przypadku jest ono wynikiem zlokalizowania w kropce tylko jednego z nośników pary elektron-dziura, podczas gdy drugi utrzymywany jest kulombowskim oddziaływaniem ładunków pomimo odpychania przez goły potencjał kropki. Zagadnienie to analizowane było w poprzednich rozdziałach tej pracy przy wykorzystaniu metody samouzgodnionych potencjałów efektywnych Hartree, zarówno w podejściu analitycznym jak i z zastosowaniem dokładniejszych technik numerycznych.

Sterowane światłem wzbudzenia ładunkowe w kropkach (w wyniku sprzężenia pola elektrycznego fali elektromagnetycznej z ładunkiem elektrycznym wzbudzenia) mogą zachodzić bardzo szybko w schemacie oscylacji Rabiiego (Dodatek A). Dwa bazowe stany to tutaj: kropka bez wzbudzenia oraz kropka ze wzbudzeniem, i π impuls oscylacji Rabiiego może być bardzo krótki dla intensywnych wiązek laserowych (łatwo osiągalne są w ten sposób subpikosekundowe czasy wzbudzenia ekscytonu w kropce).

Taka sytuacja odpowiada szybkiemu wzbudzeniu (natychmiastowemu w idealizacji) ładunkowego stanu w kropce – ale gołego stanu. Pole elektryczne fali elektromagnetycznej sprzęga się wyłącznie z ładunkiem i prowadzi do wzbudzenia gołego elektronu, dziury lub ekscytonu (czyli pary elektron-dziura). Tymczasem wzbudzenia te nie są stacjonarnymi stanami (kwazicząstkami) w całym układzie po uwzględnieniu wzbudzeń kolektywnych (w szczególności fononów) w otaczającym kropkę kryształ, oddziałujących ze zlokalizowanymi w kropce nośnikami (wzbudzeniami). Podobnie jak w materiale litym, nośniki ubierane są w kolektywne stopnie swobody (w wyniku hybrydyzacji) i tworzą efektywne kwazicząstki nazywane polaronami, w przypadku ubierania w fonony. Polarony są stabilnymi kwazicząstkami, odpowiadają stanom stacjonarnym całego układu. Polarony tworzą się zatem i w kropkach kwantowych poprzez ubieranie zlokalizowanych tam, wzbudzonych natychmiastowo (tj. subpikosekundowo) gołych stanów ładunkowych. Cały problem sprowadza się do inercji procesu ubierania w kolektywne stopnie swobody. Zbadanie kinetyki tego procesu odpowiada analizie defazowania stanu gołego natychmiastowego wzbudzenia w wyniku oddziaływania z otaczającym morzem fononów.

Zagadnienie to zostało szeroko przedstawione w pracach [75, 29] i w opracowaniach [76, 27, 28]. W dalszej części rozprawy zostanie ono opisane dla kropek pierwszego rodzaju i rozwinięte dla kropek drugiego rodzaju. Rozdziały (5 i 6) zawierają opis omawianej teorii defazowania w kropkach kwantowych, zaproponowany oryginalnie w zespole z Politechniki Wrocławskiej [75] i przedstawiany oraz rozwijany w kolejnych publikacjach i opracowaniach, także przy udziale autora

tej pracy [76, 29, 27, 28].

Dla ustalenia uwagi zajmiemy się analizą defazowania ekscytonu w kropce kwantowej (analogicznie można rozważać defazowanie elektronu lub dziury oddzielnie) w wyniku oddziaływania ładunkowych stopni swobody z fononami. Fonony to kwanty drgań sieci krystalicznej — fonony akustyczne (wiążące się z drganiami typu dźwiękowego, co odpowiada wychyleniu atomów komórki elementarnej kryształu w tę samą stronę) oraz fonony optyczne (odpowiadające wychyleniom różnoimiennych jonów w komórce elementarnej kryształu w przeciwne strony — łatwo wzbudzone są światłem w kryształach jonowych, stąd ich nazwa). Każdy z tych modów fononowych może występować w dwóch polaryzacjach — poprzecznej i podłużnej w stosunku do kierunku propagacji kolektywnego wzbudzenia. Obydwa typy fononów mogą oddziaływać z ładunkowymi stopniami swobody w kropkach kwantowych. Oddziaływanie ładunków elektronów z fononami akustycznymi ma charakter deformacyjny (powoduje lokalne przesunięcia w strukturze pasmowej), natomiast oddziaływanie z fononami optycznymi ma polaryzacyjny elektryczny charakter. Za najważniejszy wkład w oddziaływanie z elektronami/ekscytonami odpowiadają mody podłużne [77] (LO i LA, odpowiednio dla fononów optycznych i akustycznych).

W materiałach polarnych (np. GaAs jest słabo polarnym półprzewodnikiem) dominujące jest oddziaływanie z fononami LO. Wyraża się ono poprzez bezwymiarową stałą Fröhlicha [78]. Większa wartość tej stałej oznacza silniejsze oddziaływanie ładunków z fononami LO. Dla litego materiału półprzewodnika GaAs wartość tej stałej wynosi około 0.06. W kropkach kwantowych GaAs/InAs, dane z obserwacji eksperymentalnych (pochlaniań światła w zakresie podczerwieni przez kropki w polu magnetycznym i poszerzenia luminescencyjnego piku satelickiego związanego ze wzbudzeniami fononów LO, wyrażające się liczbowo przez tzw. współczynnik Huanga-Rhysa [79]) wskazują wyraźnie na co najmniej dwukrotny wzrost tej stałej — czyli silny wzrost oddziaływania z fononami LO w kropkach kwantowych. Zjawisko to zostało wyjaśnione [80] odwołując się do niejednoznaczności [77] określenia oddziaływania fononów LO z elektronami w kryształach. Oddziaływanie elektronów z fononami LO polega na polaryzowaniu sieci przez elektron poruszający się w kryształ. Ta polaryzacja (tworzy ją odpowiedni pakiet fononów optycznych) ma dynamiczny charakter i z kolei sama oddziałuje na elektron, który ją wywołał. Polaryzację tę można podzielić na dwie części: inercyjną, która nie nadąża za poruszającym się elektronem i nieinercyjną, która towarzyszy poruszającemu się elektronowi. Ta ostatnia została jednak uwzględniona już w całkowitym efektywnym polu krystalicznym definiującym sam elektron (elektron w kryształ nie jest cząstką swobodną – w swojej definicji uwzględnia periodyczny potencjał krystaliczny). Konieczność wydzielenia tylko inercyjnej części polaryzacji dla oddziaływania elektronu z fononami LO wyraża wspomnianą wyżej niejednoznaczność określenia tego oddziaływania. Gdy elek-

tron jest zamknięty w kropce kwantowej, porusza się tam z kwaziklasyczną [81] prędkością dużo większą niż swobodny elektron sieciowy. Dlatego też w przypadku kropki, elektron skuteczniej ucieka przed dynamiczną polaryzacją, co z kolei oznacza wzrost inercyjnej części polaryzacji i zatem oddziaływania elektronu z fononami LO w kropkach kwantowych. Wzrost ten jest tym większy im bardziej ograniczony (a więc i kwaziklasycznie szybszy) jest ruch elektronu. Ilościowa analiza tego zagadnienia bardzo dobrze odpowiada danym eksperymentalnym. Należy podkreślić, że silny wzrost stałej Fröhlicha w kropkach kwantowych, to także wzrost dekoherencji stanów elektronowych/ekscytonowych w kropkach na skutek wzrostu oddziaływania małego układu kropki z morzem fononów LO kryształu.

Skala energetyczna kwantowania dynamiki elektronów i ekscytonów w kropkach (odpowiadająca nanometrowym rozmiarom ograniczenia ich ruchu) jest rzędu kilku-kilkudziesięciu meV. Jak już wskazywaliśmy wyżej, taka sama skala energetyczna jest jednak również charakterystyczna dla fononów w kryształach — widma fononów LA osiągają energie do 10 – 20 meV, a szczelina fononów LO jest rzędu 30 meV [77, 78]. W przypadku kropek kwantowych mamy zatem zawsze do czynienia z reżimem silnego sprzężenia ładunkowych stopni swobody i fononów (wszystkich typów). Ta sama skala energetyczna obu wzbudzeń fononów i elektronów w kropkach prowadzi zatem do silnej wzajemnej hybrydyzacji tych wzbudzeń — czyli ubierania elektronów (dziur) lub ekscytonów w fonony i tworzenia złożonych cząstek — polaronów [77, 78, 82, 83, 84, 75, 85, 86, 87, 88].

Jak zostało wykazane [75, 27, 28], inercja sieci krystalicznej jest tak niekorzystna, że typowe czasy ubierania wzbudzeń ładunkowych w fonony lokują się w zakresie pojedynczych pikosekund, a więc w samym środku 6-rzędowego okna między dekoherencją amplitudową ekscytonów w kropkach i najszybszymi technikami ich wzbudzania. Po obu stronach pozostają okna o szerokości 3 rzędów wielkości — co jednak wyklucza możliwość implementacji kwantowej korekty błędów, wobec nie spełnienia kryterium DiVincenzo. Te silnie niekorzystne oszacowania wskazują najprawdopodobniej na niemożność skalowania komputera kwantowego w technologii kropek kwantowych (ogólniej nanostruktur ciała stałych) sterowanych światłem, przynajmniej przy obecnie znanych procedurach kwantowej korekty błędów [16, 17, 23].

Interesującą obserwacją jest tu fakt, że zasadniczy wkład w defazowanie wnoszą fonony LA, nawet wtedy, gdy w materiale polarnym (np. GaAs) oddziaływanie z fononami LO jest znacznie silniejsze. Główne defazowanie przez fonony LA wiąże się tu jednak z faktem szerokiej liniowej dyspersji fononów akustycznych i dlatego one właśnie w większym stopniu i szybciej niż inne mody fononowe zmieniają funkcję falową ładunkowego wzbudzenia w kropce, co prowadzi do defazowania.

Dekoherencja wywołana przez fonony (dekoherencja fazowa, czyli defazowanie, odpowiadająca zanikowi niediagonalnych elementów macierzy gęstości [18,

19, 20, 21]) zachodzi stosunkowo szybko [75, 27, 28] i jej czas jest rzędu ilorazu rozmiaru kropki przez prędkość dźwięku (co daje czas rzędu pikusekundy dla typowych kropek o rozmiarach ~ 10 nm).

Należy tu dodać, że fonony akustyczne są obecne w każdym materiale i dlatego wywołwana przez nie dekoherencja ma nieusuwalny charakter. Modyfikacje materiałowe mają tu niewielki wpływ. Nawet gdy usunąć fonony optyczne poprzez użycie niepolarnego półprzewodnika, fonony akustyczne – główna przyczyna defazowania – pozostaną.

Trudności dekoherencyjne z ładunkowymi stopniami swobody odwróciły uwagę od konstrukcji komputera kwantowego na kropkach kwantowych sterowanego światłem [16, 17, 75] w kierunku spinowych stopni swobody, z którymi fonony nie oddziałują bezpośrednio. Powstało kilka koncepcji bramek logicznych przy wykorzystaniu spinu elektronów w kropkach kwantowych. Jednak i one napotykają na silne ograniczenia dekoherencyjne, co będzie krótko przedstawione w jednym z kolejnych rozdziałów.

5.1 Fononowe defazowanie zlokalizowanego ekscytonu w kropce kwantowej

W celu ilościowego opisanego defazowania ładunkowych (orbitalnych) stopni swobody ekscytonu w kropce kwantowej można odwołać się do teorii sformułowanej w [75] i opisywanej w pracach [76, 29, 27, 28]. Defazowanie opisywane tym formalizmem odnosi się do efektu związanego z faktem, że szybko (nieadiabaticznie) wzbudzany w kropce ekscyton (w praktyce sub-pikosekundowo) [89, 10] jest gołą cząstką (parą elektron-dziura), która dopiero stopniowo ubiera się w fonony, tworząc polaron. Kinetyka tego procesu to właśnie defazowanie, co może być także ujęte w terminach hybrydyzacji zlokalizowanego stanu ekscytonu w kropce z kolektywnymi modami fononów pasmowych z otoczenia, czyli tworzenia ekscytonowego polaronu — ekscytonu ubranego w chmurę fononową. Przetawione w rozdziałach 5 i 6 sformułowania w nieunikniony sposób są w znacznym stopniu powtórzeniem formalizmu zawartego w pracach [75, 76, 29, 27, 28].

Układ złożony z ekscytonu w kropce kwantowej i fononów pasmowych z otoczenia opisać można przy pomocy hamiltonianu:

$$H = \sum_n E_n a_n^+ a_n + \sum_{\mathbf{q},s} \hbar\omega_s(\mathbf{q}) c_{\mathbf{q},s}^+ c_{\mathbf{q},s} + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q},n_1,n_2,s} F_s(n_1, n_2, \mathbf{q}) a_{n_1}^+ a_{n_2} (c_{\mathbf{q},s} + c_{-\mathbf{q},s}^+). \quad (5.1)$$

W hamiltonianie tym, oddziaływanie z fononami LO ($s = o$) i LA ($s = a$) jest opisane przez funkcje:

$$F_o(n_1, n_2, \mathbf{q}) = -\frac{e}{q} \sqrt{\frac{2\pi\hbar\Omega}{v\tilde{\epsilon}}} \int \Phi_{n_1}^*(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h) \times (e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_e} - e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_h}) \Phi_{n_2}(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h) d^3\mathbf{R}_e d^3\mathbf{R}_h \quad (5.2)$$

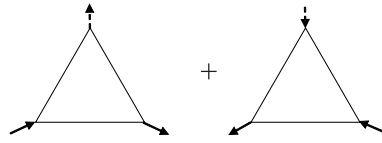
i

$$F_a(n_1, n_2, \mathbf{q}) = -\sqrt{\frac{\hbar q}{2MC_a}} \int \Phi_{n_1}^*(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h) \times (\sigma_e e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_e} - \sigma_h e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_h}) \Phi_{n_2}(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h) d^3\mathbf{R}_e d^3\mathbf{R}_h. \quad (5.3)$$

W powyższych wyrażeniach przyjęto oznaczenia:

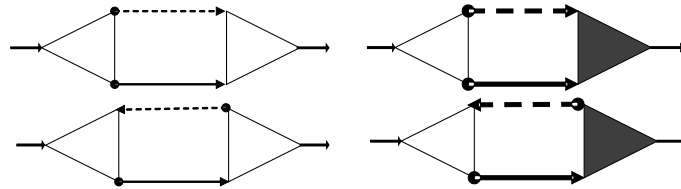
- s numeruje gałąź fononową — uwzględniamy tu fonony podłużne optyczne LO ($s = o$) i podłużne akustyczne LA ($s = a$) (oddziaływanie ładunku z podłużnymi modami jest znacznie silniejsze niż z poprzecznymi, dlatego też ograniczamy się do modów podłużnych [77, 78]),
- $c_{\mathbf{q},s}^{(+)}$ bozonowe operatory anihilacji (kreacji) dla fononów LO/LA o kwazipędzie \mathbf{q} ,
- $\omega_s(\mathbf{q})$ częstość fononów LO/LA o kwazipędzie \mathbf{q} , wynosząca odpowiednio:
 - $\omega_o(\mathbf{q}) \equiv \Omega_{\mathbf{q}} \simeq \Omega - \beta q^2,$
 - $\omega_a(\mathbf{q}) = C_a q,$
- Ω szczelina energetyczna dla fononów LO w punkcie Γ (LO,)
- C_a prędkość dźwięku (LA),
- M masa jonów w komórce elementarnej,
- $\sigma_{e,h}$ potencjał deformacyjny odpowiednio dla elektronu i dziury,
- v objętość komórki elementarnej,
- N liczba komórek elementarnych w kryształach,
- $\tilde{\epsilon}$ efektywna przenikalność dielektryczna $\tilde{\epsilon} = (1/\epsilon_\infty - 1/\epsilon_0)^{-1}$ (związana ze stałą Fröhlicha opisującą oddziaływanie naładowanej cząstki z fononami LO),
- $\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h$ współrzędne elektronu i dziury,
- $\Phi_n(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h)$ funkcja falowa ekscytonu (elektronu) w kropce,
- $a_n^{(+)}$ operator anihilacji (kreacji) ekscytonu (elektronu) [odpowiednio bozonowe (fermionowe)].

Oddziaływanie obu gałęzi fononów z ekscytonem (trzeci człon hamiltonianu) ma najprostszą strukturę — liniową w operatorach fononowych. Jest to przybliżenie modelujące oddziaływanie ładunków tworzących ekscyton z fononami z otoczenia i przypomina podobne przybliżenie stosowane do opisu oddziaływania ładunków z fotonami w ramach kwantowej elektrodynamiki. Dostrzec tu można zatem pewną analogię między ubieraniem ładunków w fotony (kwanty pola $e-m$) a ubieraniem ładunków w fonony (kwanty pola deformacji czy polaryzacji). Analogiczne będą też elementy stosowanego formalizmu w ramach metod funkcji Greena i technik graficznych Feynmana. Odwołując się do tych technik, oddziaływanie ekscyton-fonon przedstawić można przy pomocy wierzchołka jak na rys. 5.1.



Rys. 5.1. Wierzchołki reprezentujące oddziaływanie ekscyton-fonon; linie przerywane reprezentują fonon, natomiast linie ciągłe odpowiadają ekscytonowi.

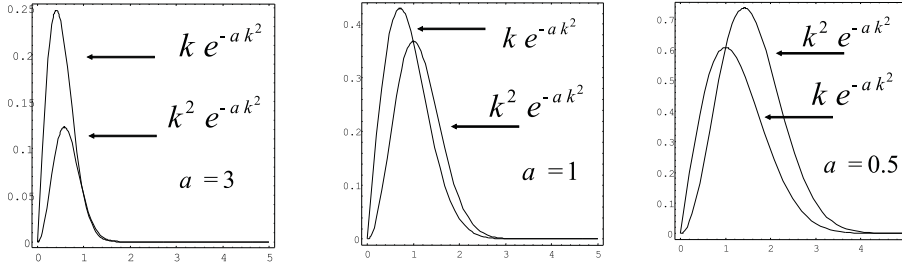
Posługując się wierzchołkami jak na rys. 5.1 łatwo zapisać równanie na operator masowy (w ramach formalizmu funkcji Greena) ekscytonowej funkcji Greena. Zgodnie z zasadami technik graficznych łatwo zauważyć, że dla 'trójkątnego' wierzchołka najniższy co do rzędu w tym oddziaływaniu człon wchodzący do operatora masowego odpowiada grafowi jak na rys. 5.2.



Rys. 5.2. Operator masowy ekscytonu; dwa grafy po prawej odpowiadają pełnym wyrażeniom na operator masowy (grube linie reprezentują pełne funkcje Greena; zaznaczony jest też efektywny wierzchołek oddziaływania ekscytonu z fononami [zaciemniony wierzchołek]); po lewej przestawiony jest wkład najniższego rzędu do operatora masowego, kiedy pełne funkcje Greena zastąpić zerowymi a efektywny wierzchołek gołym wierzchołkiem.

W pierwszym przybliżeniu operator masowy można przedstawić przy pomocy uproszczonego wyrażenia, kiedy w dokładnym grafie na operator masowy (po prawej na rys. 5.2) zastąpić efektywny wierzchołek gołym wierzchołkiem, a wewnętrzne pełne funkcje Greena ich zerowym przybliżeniem (jak na rys. 5.2 lewy). Przybliżenie takie odpowiada pominięciu wszystkich członów wyższego rzędu niż kwadratowy względem oddziaływaniu. Przybliżenie to uzasadnione jest faktem, że oddziaływanie ładunków z fononami jest słabe i wielo-fononowe efekty związane z wyższymi rzędami w oddziaływaniu odpowiadać będą poprawkom z małym parametrem w kolejnych potęgach.

Gołe wierzchołki oddziaływania ekscyton-fonon, to funkcje występujące w hamiltonianie i mają postać [77, 78] wyrażoną formułami (5.2, 5.3). Całki w tych wyrażeniach opisują przekrycie zlokalizowanych stanów (początkowego i końcowego) ekscytonu i fali płaskiej fononu sieciowego. W ten sposób, w wyniku wzajemnego przekrycia zlokalizowanych i niezlokalizowanych funkcji falowych, napotykamy tutaj na przejaw charakterystycznego dla kropek efektu szyjki butelki



Rys. 5.3. Porównanie zależności form-faktorów oddziaływania ekscyton-fonon LO ($\sim k^2 e^{-ak^2}$), i LA ($\sim k e^{-ak^2}$), zgodnie z równaniami (5.5), dla różnych wartości parametru a (wg [27, 28]).

(*bottle-neck effect*) [90, 91]. Lokalizacja łamie translacyjną niezmienniczość układu, co prowadzi do uchylenia zachowania pędu (kwazipędu) dla tych elementów macierzowych oddziaływania (stany zlokalizowane nie są bowiem stanami własnymi pędu /kwazipędu/, w przeciwieństwie do stanów pasmowych fononów). Występująca w elemencie macierzowym całka przekrycia z falą płaską prowadzi tu do charakterystycznej dla *bottle-neck* preferencji pędów $q \simeq \frac{\hbar}{d}$, gdzie d rozmiar kropki (na podstawie jakościowego oszacowania całki przekrycia). Można zatem spodziewać się, że te całki eliminują wszystkie mody fononowe ze strefy Brillouina poza tymi, które leżą w pobliżu $q \simeq \frac{\hbar}{d}$ (d jest rozmiarem kropki kwantowej, typowo rzędu 10 nm). Oznacza to, że obszar istotnych kwazipędów fononów oddziałujących z ładunkiem w kropce jest rzędu co najwyżej kilku procent strefy Brillouina w pobliżu jej środka. Zostało to uwidocznione wyraźnie na rysunku 5.3, gdzie niezerowa wartość całki przekrycia lokuje się w pobliżu punktu Γ .

W celu opisanego stanu ekscytonu w kropce kwantowej wygodnie posłużyć się modelową (wariacyjną) funkcją falową ekscytonu w parabolicznej kropce kwantowej dla stanu podstawowego ekscytonu (wariacyjna postać tej funkcji pozwala na uwzględnienie oddziaływania kulombowskiego między elektronem i dziurą tworzącymi ekscyton). Funkcję taką zapisać można w postaci,

$$\Phi_0(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \frac{1}{(\pi)^{3/2}} \frac{1}{L_e L_h L_z} \exp \left[-\frac{r_{e\perp}^2}{2L_e^2} - \frac{r_{h\perp}^2}{2L_h^2} - \frac{z_e^2 + z_h^2}{2L_z^2} \right], \quad (5.4)$$

gdzie $r_{e,h\perp}$ oznaczają położenia składników (e i h) w płaszczyźnie kropki xy . Numerycznie znalezione parametry [75, 27] dla kropki o charakterystykach podanych w Tab.1. (tabela ta przepisana jest z pracy [27]) wynoszą $L_e = 6.6\text{nm}$, $L_h = 5.1\text{nm}$, i $L_z = l_z$ (podkreślić tu można dobrą zgodność z dokładniejszym rachunkiem numerycznym przeprowadzonym w ujęciu numerycznej dokładnej diagonalizacji [75]).

Analityczna postać funkcji falowej ekscytonu w stanie podstawowym w kropce kantowej (5.3) pozwala na proste obliczenie formfaktorów (całek przekrycia)

opisujących sprzężenie ekscytonu w kropce z fononami pasmowymi [75, 27, 28]:

$$\begin{aligned} |F_o(0, 0, \mathbf{k})|^2 &\simeq \frac{\pi e^2 \hbar \Omega k^2}{18 v \bar{\epsilon}} (L_e^2 - L_h^2)^2 e^{-\alpha k^2} = g_o \frac{k^2}{k_m^2} e^{-\alpha k^2}, \\ |F_a(0, 0, \mathbf{k})|^2 &\simeq \frac{\hbar k}{2 M C_a} (\sigma_e - \sigma_h)^2 e^{-\alpha k^2} = g_a \frac{k}{k_m} e^{-\alpha k^2}, \end{aligned} \quad (5.5)$$

gdzie $k_m = (6\pi^2/v)^{1/3}$ jest falowym wektorem Debye ($\simeq 1.1 \cdot 10^{10} \text{m}^{-1}$), $\alpha = l^2/2$, l oznacza tu rozmiar kropki uśredniony po wszystkich kierunkach (jest uśrednionym po kierunkach rozmiarem przestrzennym stanu podstawowego ekscytonu), takim samym dla e i h (l jest znacznie mniejsze niż boczne rozmiary $L_{e(h)}$ występujące w modelowej wariacyjnej funkcji falowej, ale jest większe niż pionowy rozmiar, L_z — jest to właśnie wynik uśrednienia po wszystkich kierunkach). Czynniki eksponencjalny $e^{-\alpha k^2}$ wiąże się z opisanym wyżej efektem szyjki butelki w kropce kwantowej. Te prosty analityczny wynik daje podstawy do jakościowej analizy formfaktorów jak na rys. 5.3 (warto dodać, że mimo prostoty, wynik ten dobrze aproksymuje dokładniejszy numeryczny rezultat [75]). Ważne jest by zauważyć, że form-faktory oddziaływania ekscyton-fonon są niezerowe w pobliżu punktu Γ i osiągają swoje maksimum dla kwazipędu $p \simeq \frac{\hbar}{d}$ ($d \sim l$). Można dodać jeszcze raz, że jest to efekt związany z niewspółmiernością zlokalizowanego stanu na kropce kwantowej i niezlokalizowanego fononu (czyli, jak zauważono poprzednio, *bottle-neck* zastępuje zasadę zachowania pędu dla układu bez translacyjnej inwariantności) [90, 91].

Tab.1. Parametry kropki i materiału otoczenia, GaAs/InAs, wg [27]

masa efektywna elektronu w GaAs	m_e^*	$0.067m_e$
masa efektywna dziury (ciężkiej) w GaAs	m_h^*	$0.38m_e$
przenikalność dielektryczna w GaAs (statyczna)	ϵ_0	12.9
przenikalność dielektryczna w GaAs (dynamiczna)	ϵ_∞	10.9
potencjał deformacyjny elektronu w GaAs	σ_e	6.7 eV
potencjał deformacyjny dziury w GaAs	σ_h	-2.7 eV
szczelina energetyczna fononów LO w GaAs	$\hbar\Omega$	36.4 meV
gęstość GaAs	ρ	5.36 g/cm^3
prędkość dźwięku (LA) w GaAs	C_a	$4.8 \times 10^5 \text{ cm/s}$
energia wiązania elektronu w kropce GaAs/InAs	$\hbar\omega_0^e$	20 meV
energia wiązania dziury w kropce GaAs/InAs	$\hbar\omega_0^h$	3.5 meV
rozmiar kropki kwazi-2D (elektron)	$l_e = \sqrt{\frac{\hbar}{m_e^* \omega_0^e}}$	7.5 nm
rozmiar kropki kwazi-2D (dziura)	$l_h = \sqrt{\frac{\hbar}{m_h^* \omega_0^h}}$	7.5 nm
wysokość kropki (elektronu i dziury)	$l_z^{e(h)}$	2 nm
wektor falowy Debye w GaAs	$k_m = \left(\frac{6\pi^2}{v}\right)^{1/3}$	$1.1 \times 10^{10} \text{ m}^{-1}$
stała Fröhlicha w GaAs- <i>bulk</i> (elektronu)	$\alpha_e = \frac{e^2}{\bar{\epsilon}} \sqrt{\frac{m_e^*}{2\hbar^3 \Omega}}$	0.07
stała Fröhlicha w kropce GaAs/InAs (elektronu)	$\alpha_e' = \frac{e^2}{\bar{\epsilon}'} \sqrt{\frac{m_e^*}{2\hbar^3 \Omega}}$	0.15

Tab. 2. Parametry oddziaływania ekscyton-fonon LA i LO dla kropki GaAs/InAs, wg [27]

stała sprzężenia ekscyton-fonon LA	$A = \frac{(\sigma_e - \sigma_h)^2}{4\pi\rho\hbar^3 C_s^3} \simeq 0.29 \text{ meV}^{-2}$
stała sprzężenia ekscyton-fonon LO	$B = \frac{e^2 \hbar \Omega (L_e^2 - L_h^2)^2}{36\epsilon^2 (\hbar\beta)^{5/2}} \simeq \left(\frac{l[nm]}{6}\right)^4 6.3 \times 10^5 \text{ meV}^{-1/2}$
rozmiar ekscytonu(elektronu)	$L_e \simeq 6.6(l[nm]/6) \text{ nm}$
rozmiar ekscytonu(dziury)	$L_h \simeq 5.1(l[nm]/6) \text{ nm}$
wykładnik w operatorze masowym (LA)	$\frac{\alpha}{\hbar^2 C_a^2} \simeq (l[nm]/6)^2 1.8 \text{ meV}^{-2}$
wykładnik w operatorze masowym (LO)	$\frac{\alpha}{\hbar\beta} \simeq (l[nm]/6)^2 149 \text{ meV}^{-1}$

Efekt defazowania ekscytonu w wyniku ubierania w chmurę fononową łątwo opisać można ilościowo poprzez zmianę funkcji falowej kompleksu ekscyton-fonony w stosunku do wyjściowej funkcji falowej gołego ekscytonu, czyli ilościowego ujęcia kinetyki hybrydyzacji lokalnych (ekscyton) i globalnych (fonony) stopni swobody złożonego całego układu. W odniesieniu do dziedziny informatyki kwantowej wprowadzić można pojęcie ufności i utraty ufności (*fidelity loss*) [23] rozważając [75, 27, 28] ekscytonową funkcję korelacyjną $\langle a_{n_1}(t)a_{n_2}^+(0) \rangle$. Dla $n_1 = n_2$ odpowiada ona właśnie przekryciu stanu ekscytonu w chwili t z tym stanem w chwili początkowej $t = 0$ (dla $n_1 = n_2 = 0$ — stanu podstawowego ekscytonu stopniowo zmieniającego się w polaron w wyniku ubierania w chmurę fononów LA i LO). Moduł tej funkcji korelacyjnej może być traktowany jako miara ufności zależnego od czasu (niestacjonarnego) stanu ekscytonu. Jest to ilościowe i równocześnie proste ujęcie kinetyki defazowania, czyli kinetyki ubierania ekscytonu w chmury fononowe, lub inaczej, kinetyki tworzenia polaronu.

Występujące w powyższym wyrażeniu uśrednienie $\langle \dots \rangle$ oznacza temperaturowe uśrednienie po stanach fononów (typowe uśrednienie po zespole wielkim kanonicznym), jednakże przy założeniu stanu tzw. próżni ekscytonowej [92], tzn. bez zmiany stanu gołego ekscytonu. Wiąże się to z faktem, że sektor w wielkim rozkładzie kanonicznym bez ekscytonów (czyli próżnia) jest energetycznie znacznie oddalony od kolejnych sektorów ekscytonowych. Oddalenie to jest rzędu $\sim 1eV$ i wyraża energię wzbudzenia ekscytonu poprzez przerwę wzbronioną półprzewodnika.

Bardzo pomocna jest tu fourierowska analiza funkcji korelacyjnej. Transformata Fouriera funkcji korelacyjnej nazywana jest intensywnością spektralną [93, 94, 95],

$$I_{n_1, n_2}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \langle a_{n_1}(t)a_{n_2}^+(0) \rangle e^{i\omega t} dt, \quad (5.6)$$

Intensywność spektralną łatwo wyrazić poprzez urojoną część retardowanej funkcji Greena:

$$\text{Im}G_r(n_1, n_2, \omega) = -I(n_1, n_2, \omega)/(2\hbar), \quad (5.7)$$

gdzie retardowana komutacyjna funkcja Greena ekscytonu wyraża się następującym wzorem,

$$\begin{aligned} G_r(n_1, n_2, t) &= -\frac{i}{\hbar} \Theta(t) \langle [a_{n_1}(t), a_{n_2}^+(0)]_- \rangle \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G_r(n_1, n_2, \omega) e^{-i\omega t} d\omega. \end{aligned} \quad (5.8)$$

Zgodnie ze standardowymi technikami matsubarowskich funkcji Greena dla urojonego czasu, można znaleźć (poprzez odpowiednie przedłużenie analityczne) funkcję $G_r(n_1, n_2, t)$ i jej transformatę Fouriera, czyli funkcję korelacyjną, poprzez uwzględnienie oddziaływania ekscytonu z morzem fononów LO i LA [93, 94]. Można tu dodać, że równoważny formalizm tzw. temperaturowych kauzalnych funkcji Greena [95] prowadzi do takich samych wyników. Formalizm funkcji kauzalnych był mniej popularny z uwagi na krytykowany brak kontroli dokładności tzw. rozszczepień Tiablikova [95], jednakże w latach 70. wykazano równoważność metody z bardziej klarownymi metodami perturbacyjnymi funkcji matsubarowskich ujętych technikami graficznymi Feynmana. Zatem można stwierdzić, że obie metody prowadzą do równania Dysona z odpowiednim operatorem masowym, poprzez który włącza się oddziaływanie ekscytonu z morzem fononów.

Jak zauważono wyżej, w przypadku słabego sprzężenia ekscyton-fonony (a z takim mamy tu właśnie do czynienia) operator masowy przyjmuje postać [95, 93, 94] zgodnie z grafami jak na rys. 5.2. Warto tu zauważyć, że podobnie jak wcześniej było to przedmiotem analiz w układzie litym półprzewodnika [96], uzyskano tu [75, 27] z dokładnością do g_s^2 , $[F_s(n_1, n_2, \mathbf{k}) \sim g_s$, gdzie g_s jest stałą sprzężenia ekscyton-fonon], rzeczywistą i urojoną część operatora masowego M w następującej postaci,

$$\Delta_n(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, s, n_1} |F_s(n, n_1, \mathbf{k})|^2 \left[\frac{(1+N_{\mathbf{k}, s})[\hbar\omega - E_{n_1} - \Delta_{n_1}(\omega - \omega_s(\mathbf{k})) - \hbar\omega_s(\mathbf{k})]}{[\hbar\omega - E_{n_1} - \Delta_{n_1}(\omega - \omega_s(\mathbf{k})) - \hbar\omega_s(\mathbf{k})]^2 + \gamma_{n_1}^2(\omega - \omega_s(\mathbf{k}))} + \frac{N_{\mathbf{k}, s}[\hbar\omega - E_{n_1} - \Delta_{n_1}(\omega + \omega_s(\mathbf{k})) + \hbar\omega_s(\mathbf{k})]}{[\hbar\omega - E_{n_1} - \Delta_{n_1}(\omega + \omega_s(\mathbf{k})) + \hbar\omega_s(\mathbf{k})]^2 + \gamma_{n_1}^2(\omega + \omega_s(\mathbf{k}))} \right] \quad (5.9)$$

oraz

$$\gamma_n(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, s, n_1} |F_s(n, n_1, \mathbf{k})|^2 \left[\frac{(1+N_{\mathbf{k}, s})\gamma_{n_1}(\omega - \omega_s(\mathbf{k}))}{[\hbar\omega - E_{n_1} - \Delta_{n_1}(\omega - \omega_s(\mathbf{k})) - \hbar\omega_s(\mathbf{k})]^2 + \gamma_{n_1}^2(\omega - \omega_s(\mathbf{k}))} + \frac{N_{\mathbf{k}, s}\gamma_{n_1}(\omega + \omega_s(\mathbf{k}))}{[\hbar\omega - E_{n_1} - \Delta_{n_1}(\omega + \omega_s(\mathbf{k})) + \hbar\omega_s(\mathbf{k})]^2 + \gamma_{n_1}^2(\omega + \omega_s(\mathbf{k}))} \right], \quad (5.10)$$

gdzie $N_{\mathbf{k}, s}$ oznacza jednocząstkową funkcją rozkładu Bosego-Einsteina określającą temperaturową populację modu fononowego \mathbf{k}, s , $M_{n, n}(\omega) = \Delta_n(\omega) - i\gamma_n(\omega)$, $G_r(n, n, \omega) = [\hbar\omega - E_n - M_{n, n}(\omega) + i\epsilon]^{-1}$ (dla $T = 0$, $N_{\mathbf{k}, s} = 0$). Ten układ równań pozwala na ilościową analizę kinetyki procesu ubierania ekscytonu w chmurę fononową.

Odnosnie materiału otoczenia kropki, tj. GaAs, dane materiałowe przyjęto w [75, 27] za pracą [97], a dla kropki InAs/GaAs przyjęto modelowo paraboliczne przybliżenie [1] z krzywizną $\hbar\omega_0^e = 20$ meV, $\hbar\omega_0^h = 3.5$ meV, $l_e = \sqrt{\frac{\hbar}{m_e^* \omega_0^e}} = l_h = \sqrt{\frac{\hbar}{m_h^* \omega_0^h}} = 7.5$ nm. Prowadzi to do jednakowego rozmiaru przestrzennego stanu podstawowego elektronu i dziury (bez oddziaływania kulombowskiego); pionowy rozmiar kropki wybrano [75, 27] (przyjęto tu model kwazidwuwymiarowej kropki,

czyli kropka jest silnie spłaszczona) $l_z^{e(h)} \simeq 2$ nm (z odpowiednio dopasowaną krzywizną paraboli $\omega_z^{e(h)}$).

Oddziaływania ekscytonu z fononami optycznymi LO ujmowane jest zwykle przy pomocy stałej Fröhlicha [77, 78]:

$$\alpha_e = \frac{e^2}{\epsilon} \sqrt{\frac{m^*}{2\hbar^3\Omega}}, \quad (5.11)$$

Interesującym wynikiem jest obserwowany eksperymentalnie silny wzrost tej stałej w nanostrukturach [84, 82], co ma zapewne istotny wpływ na procesy polaronowe w kropkach. Wyjaśnienie tego silnego wzrostu sprzężenia z fononami LO uzyskano w zespole z Politechniki Wrocławskiej [84] i z powodu istotności tego efektu dla kinetyki tworzenia polaronów w kropkach kwantowych będzie zreferowane w jednym z kolejnych podrozdziałów tej pracy.

Przyglądając się równaniu (5.9) zauważyć można, że główny wkład do przesunięcia energetycznego polaronu w stosunku do gołego ekscytonu daje pierwszy człon związany z oddziaływaniem z fononami optycznymi, dużo silniejszym oddziaływaniem w stosunku do oddziaływania z fononami akustycznymi. Związane z tym przesunięcie energetyczne polaronu następuje w kierunku niższych energii (*red-shift*, co wynika ze stabilności polaronu). Warunkiem koniecznym jest jednak materiał polarny (GaAs jest słabo polarnym materiałem), w którym mogą rozchodzić się fonony optyczne i pojawiać się, w związku z tym, oddziaływanie ekscytonu z fononami LO. Zauważyć można także, że równania (5.9)-(5.10) zawierają pełną funkcję Greena, co wobec zastąpienia efektywnego wierzchołka gołym wierzchołkiem (grafy na rys. 5.2), prowadzić może do pewnego przewyższenia dokładności przybliżenia — będzie to jednak ściśle kontrolowane na kolejnych etapach przedstawianej w dalszym ciągu analizy.

Jeśli położyć teraz $\gamma_n(\omega) = 0$ w prawej części równania (5.9), jako pierwsze przybliżenie na przesunięcie energetyczne uzyskuje się:

$$\begin{aligned} \Delta_n(\omega) = & \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, n_1} |F_o(n, n_1, \mathbf{k})|^2 \left[\frac{1 + N_{\mathbf{k},o}}{\hbar\omega - E_{n_1} - \Delta_{n_1}(\omega - \Omega) - \hbar\Omega} \right. \\ & \left. + \frac{N_{\mathbf{k},o}}{\hbar\omega - E_{n_1} - \Delta_{n_1}(\omega - \Omega) + \hbar\Omega} \right] \\ & + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, n_1} |F_a(n, n_1, \mathbf{k})|^2 \left[\frac{1 + N_{\mathbf{k},a}}{\hbar\omega - E_{n_1} - \Delta_{n_1}(\omega - C_a k) - \hbar C_a k} \right. \\ & \left. + \frac{N_{\mathbf{k},a}}{\hbar\omega - E_{n_1} - \Delta_{n_1}(\omega - C_a k) + \hbar C_a k} \right]. \end{aligned} \quad (5.12)$$

Jak zauważono wyżej, z powodu przewagi oddziaływania ekscytonu z fononami optycznymi, pierwszy człon tego równania wnosi dominujący wkład i drugi opisujący przesunięcie energetyczne wywołane oddziaływaniem z fononami akustycznymi — co najmniej o rząd mniejszy — można zaniedbać w tym miejscu. Należy

jednak dostrzec, że ten mniejszy człon wnosi jednak istotniejszy niż człon pierwszy wkład do pochodnej $d\Delta/d\omega|_{\omega=E+\Delta}$, ponieważ pochodna pierwszego członu $[\sim F^2/(\hbar\Omega)^2]$ jest mała z powodu szczeliny w dyspersji fononów LO. Ta pochodna jest istotna dla określenia residuum funkcji Greena w biegunie — w równaniu (5.15).

Numeryczne rozwiązanie równania (5.12) dla $n = 0$ (opisane w [75]) prowadzi do obliczenia przesunięcia energetycznego polaronu $\Delta_0 \sim -5$ meV (dla parametrów struktury jak podano w Tab. 1.), co jest stosunkowo znacznym przesunięciem i wskazuje na silny wpływ polaronowych efektów na strukturę energetyczną kropki kwantowej (w zakresie do 10%), co przewyższa wiele innych efektów związanych np. z nieparabolicznością kropki i jej szczegółami geometrycznymi. Kinetyka tworzenia polaronów w kropkach, jest, jak się okaże z dalszej analizy, stosunkowo wolna, a to prowadzić będzie do szerokiego rozmycia mocno poprzesuowanych poziomów energetycznych kropki po uwzględnieniu oddziaływania z fononami. Można zatem już teraz stwierdzić, że kropki kwantowe odbiegają swoją strukturą od struktury zwykłych atomów odpornych na oddziaływanie z fononami, co wskazuje, że częste określenie kropek kwantowych jako sztucznych atomów jest w istocie trochę mylące.

Dla opisu kinetyki tworzenia polaronu, czyli interesującego nas procesu defazowania wzbudzonego nieadiabaticznie (tj. szybko, w praktyce sub-pikosekundowo [89]) ekscytonu najistotniejsza jest urojona część operatora masowego i **poza-biegunowe** zachowanie urojonej części funkcji Greena. Niezbędna jest tu pełna znajomość intensywności spektralnej, a nie tylko jej biegunów określających energię i czasy życia wzbudzeń, czyli kwazicząstek, w rozpatrywanym przypadku — polaronu. Jest to łatwo zauważalne, gdyż dopiero transformata Fouriera całej intensywności spektralnej (a nie tylko jej części biegunowej) daje poszukiwaną funkcję korelacyjną, która opisuje utratę ufności wyjściowego stanu kwantowego. Urojona część operatora masowego określona jest poprzez równanie (5.10). Kładąc podobnie jak poprzednio, w prawej stronie tego równania $\gamma = 0$, otrzymano [75, 27, 28]:

$$\begin{aligned} \gamma_n(\omega) = & \frac{\pi}{N} \sum_{\mathbf{k}, n_1} \{ |F_o(n, n_1, \mathbf{k})|^2 \\ & [(1 + N_{\mathbf{k}, o})\delta(\hbar\omega - E_{n_1} - \Delta_{n_1} - \hbar\Omega_{\mathbf{k}}) \\ & + N_{\mathbf{k}, o}\delta(\hbar\omega - E_{n_1} - \Delta_{n_1} + \hbar\Omega_{\mathbf{k}})] \\ & + |F_a(n, n_1, \mathbf{k})|^2 [(1 + N_{\mathbf{k}, a})\delta(\hbar\omega - E_{n_1} - \Delta_{n_1} - \hbar C_a k) \\ & + N_{\mathbf{k}, a}\delta(\hbar\omega - E_{n_1} - \Delta_{n_1} + \hbar C_a k)] \}. \end{aligned} \quad (5.13)$$

Pierwszy człon w równaniu (5.13) określa transfer energii polaryzacyjnej do morza fononów LO, drugi natomiast opisuje transfer energii (mniejszej) deformacyjnej do morza fononów LA. Obydwa przekazy energii towarzyszą powstawaniu polaronu, czyli stopniowemu ubieraniu ekscytonu w mody fononowe optyczne i akustyczne. Człon γ można obliczyć dla stanu podstawowego ekscytonu

($n = 0$) [zaniedbując wyższe wzbudzone poziomy ekscytonowe] wykonując całkowanie względem \mathbf{k} (i wykorzystując deltę Diraca) [27, 28],

$$\begin{aligned} \gamma_0(\omega) \simeq & Ax^3 e^{-\frac{\alpha x^2}{\hbar^2 C_a^2}} [\Theta(x)(1 + N(x)) - \Theta(-x)N(-x)] \\ & + B \left[\Theta(\hbar\Omega - x)(\hbar\Omega - x)^{3/2} e^{-\frac{\alpha(\hbar\Omega - x)}{\hbar\beta}} \Theta(-0.6\hbar\Omega + x)(1 + N(x)) \right. \\ & \left. + \Theta(\hbar\Omega + x)(\hbar\Omega + x)^{3/2} e^{-\frac{\alpha(\hbar\Omega + x)}{\hbar\beta}} \Theta(-0.6\hbar\Omega - x)N(-x) \right], \end{aligned} \quad (5.14)$$

tutaj $x = \hbar\omega - \tilde{E}_0$, $\tilde{E}_0 = E_0 - \Delta_0$ oznacza energię względem ekscytonowego polaronu (mierzoną od zera, tj. zero oznacza energię ubranego polaronu), $N(x) = (e^{\frac{x}{k_B T}} - 1)^{-1}$,

$$A = \frac{(\sigma_e - \sigma_h)^2}{4\pi\rho\hbar^3 C_a^5}, \quad B = \frac{e^2 \hbar\Omega (L_e^2 - L_h^2)^2}{36\tilde{\epsilon}2(\hbar\beta)^{5/2}}$$

(dyspersję fononów LO została przyjęta w postaci [98] $\Omega_{\mathbf{k}} = \Omega - \beta k^2$ i dla granicy strefy $k = k_m$, $\Omega_{\mathbf{k}_m} = 0.6\Omega$). Podobnie jak poprzednio, pierwszy człon w równaniu (5.14) odpowiada kanałowi dyssypacji energii do fononów LA, natomiast drugi — kanałowi dyssypacji do fononów LO. Parametry liczbowe tego równania dla badanej struktury (Tab. 1) podane są w Tab. 2. za oryginalną publikacją [75], powtórzone następnie w opracowaniach [27, 28].

Łatwo zauważyć, że γ_0 jest równe 0 w $x = 0$ [wynika to z postaci równania (5.14)], co oznacza, że punkt ten jest dobrze określonym biegunem funkcji Greena (odpowiada stabilnej kwazicząstce — ekscytonowemu polaronowi [78, 99]). Jak przedstawiono wyżej, ewolucja czasowa ubierania w fonony opisana jest przez funkcję korelacyjną, związaną z funkcją Greena, która może zostać zapisana w następującej postaci:

$$\begin{aligned} G_r(0, 0, \omega) &= \frac{1}{\hbar\omega - E_0 - \Delta(\omega) + i\gamma(\omega) + i\epsilon} \\ &= \frac{a^{-1}}{x + i\gamma'(x) + i\epsilon}, \end{aligned} \quad (5.15)$$

gdzie

$$\begin{aligned} a &= 1 - \left. \frac{d\Delta(\omega)}{\hbar d\omega} \right|_{\omega=\tilde{E}'_0} \\ &= 1 + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, s} \left| \frac{F_s(0, 0, \mathbf{k})}{\hbar\omega_s(\mathbf{k})} \right|^2 [1 + 2N_s(\mathbf{k})], \end{aligned} \quad (5.16)$$

$\gamma'(x) = \gamma(x)/a$ ($x = \hbar\omega - \tilde{E}'_0$, $\tilde{E}'_0 = \tilde{E}_0/a$), $\epsilon = 0+$. Bezpośrednim rachunkiem można znaleźć urojoną część tej retardowanej funkcji Greena (5.15), czyli,

$$\text{Im}G_r(0, 0, \omega) = -a^{-1}\pi\delta(x) - \frac{a^{-1}\gamma'(x)/x^2}{1 + (\gamma'(x)/x)^2}. \quad (5.17)$$

Wykonanie odwrotnej transformaty Fouriera intensywności spektralnej (która wyraża się przez znaną wyżej urojoną część retardowanej funkcji Greena)

pozwała na znalezienie funkcji korelacyjnej zależnej czasu, czyli tej wielkości, która określa utratę ufności wyjściowego stanu wzbudzonego nieadiabatycznie,

$$I(t) = -2\hbar \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \operatorname{Im} G_r(0, 0, \omega) e^{-i\omega t},$$

(indeksy $n_1 = n_2 = 0$ funkcji I są tu ukryte).

Pierwszy człon w (5.17) prowadzi do wyrażenia,

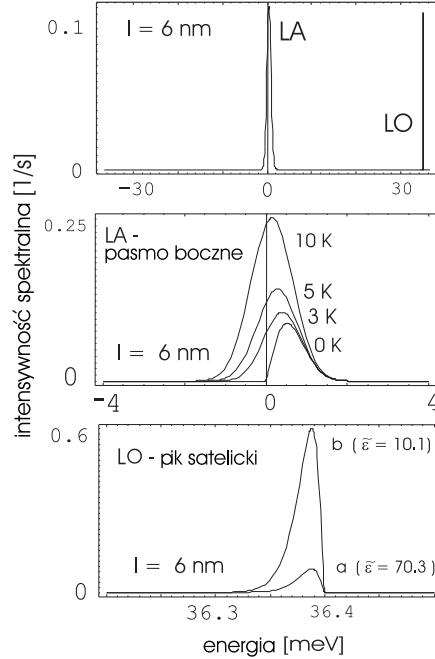
$$I^{(1)}(t) = a^{-1} e^{-i \frac{\tilde{E}_0}{\hbar} t}.$$

Ważne jest zauważyć tu, że zgodnie z założoną dokładnością (czyli pominięciem procesów wielofononowych w równaniu na operator masowy) w drugim członie w równaniu (5.17) można pominąć drugi człon w mianowniku [27, 28] (jest mały w stosunku do pierwszego) dla fononów LA. To pozwala na zmianę kolejności całkowania względem ω i \mathbf{k} — najpierw można wykonać odwrotną transformatę Fouriera i przy tej całce wykorzystać deltę Diraca w równaniu (5.13). To całkowanie po częstotliwości (czyli energii) prowadzi do bardzo wygodnej reprezentacji dla funkcji korelacyjnej

$$I^{(2)}(t) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left| \frac{F_a(0,0,\mathbf{k})}{\hbar\omega_a(\mathbf{k})} \right|^2 \times \left\{ [1 + N_s(\mathbf{k})] e^{-i[\tilde{E}_0/\hbar + \omega_s(\mathbf{k})]t} + N_s(\mathbf{k}) e^{-i[\tilde{E}_0/\hbar - \omega_s(\mathbf{k})]t} \right\}. \quad (5.18)$$

Intensywność spektralna i odwrotna jej transformata Fouriera (jej moduł) znalezione w pracach [75, 29], są szczegółowo opisane w [27, 29, 28] dla różnych temperatur i rozmiarów kropek. Odwołując się do tych ilustracji, na rys. 5.4 przedstawiona została intensywność spektralna z widocznym szerokim pasmem bocznym od fononów LA (dla kilku temperatur) i z pikami satelickimi od fononów LO (z zaznaczeniem wpływu renormalizacji stałej Fröhlicha). Pasma boczne nie charakteru lorencjanu, ponieważ nie opisuje poszerzenia piku centralnego, natomiast odpowiada czasowej ewolucji procesu defazowania. Na rys. 5.5 przedstawiona jest z kolei transformata Fouriera intensywności spektralnej, czyli funkcja korelacyjna wyrażająca utratę ufności — czyli bezpośrednią charakterystykę defazowania ekscytonu w kropce, dla różnych temperatur i rozmiarów kropek. Wielkość ta mierzona jest eksperymentalnie. Dobra zgodność obliczonej funkcji korelacyjnej ze zmierzoną w eksperymencie [89] — rys. 5.5 (górny), dla małej kropki i sub-pikosekundowego jej ekscytonowego wzbudzenia, potwierdza słuszność rozwiniętej teorii [75]. Zauważyć tu można istotną własność — defazowanie ekscytonu przez fonony nie znika w $T = 0$ K, ale utrzymuje się w zerowej temperaturze na skutek emisji fononów, mimo że dla $T = 0$ K efekty absorpcyjne nie występują (fononów nie ma ale mogą być wzbudzane). Temperaturowe zachowanie pasma bocznego i pików satelickich na rys. 5.4 odzwierciedla tę własność.

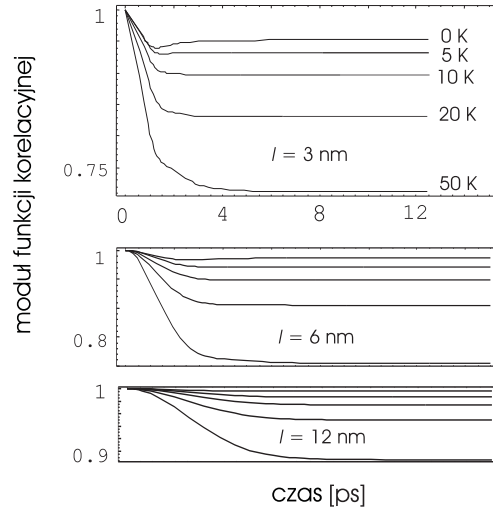
Kanał LA, (mimo, że energetycznie zaniedbywalny w porównaniu do kanału LO w GaAs), jest najszybszy i najwydajniejszy w procesie defazowania. Niewielka



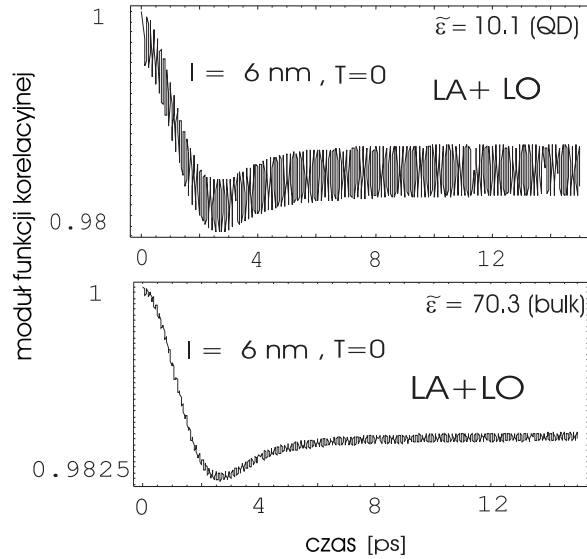
Rys. 5.4. Intensywność spektralna względem energii ($x = \hbar\omega - \tilde{E}'_0$) dla kropki o uśrednionym po kierunkach rozmiarze $l = 6$ nm (górny); ewolucja temperaturowa pasma bocznego od fononów LA (środkowy) i pik satelicki od fononów LO (dolny). Tylko pasmo boczne LA rośnie z temperaturą (w rozważanym zakresie temperatur); procesy absorpcji są nieistotne dla fononów LO w tym zakresie temperatur (lewy pik satelicki odpowiadający absorpcji fononów LO jest kilka rzędów mniejszy niż prawy — emisyjny, nabiera znaczenia dopiero dla $T > 80$ K); satelicki pik LO wzrasta istotnie wraz ze wzrostem stałej Fröhlicha w kropce [co można wyrażać przez współczynnik Huanga-Rhysa] [79] — stała Fröhlicha *bulk* (a), w kropce (b); rysunek z opracowania [27, 28].

zmiana energii nie oznacza bowiem proporcjonalnie niewielkiej zmiany funkcji falowej. Ta ostatnia zmiana, zasadnicza dla procesu defazowania, wiąże się z innymi czynnikami, jak typ widma modu fononowego i preferuje fonony LA. Włączenie kanału LO słabo modyfikuje silne defazowanie przez fonony LA, co zilustrowano na rys. 5.6 i 5.7.

Ważnym rezultatem [75, 27, 29, 28] jest sposób skalowania czasu defazowania w zależności od rozmiaru kropki, co zostało przedstawione na rys. 5.7 (prawy). Przebieg ten jest liniowy dla kanału LA i kwadratowy dla kanału LO. To zachowanie dobrze odpowiada prostej zależności: czas defazowania $\simeq \frac{l}{v_g}$, v_g — prędkość



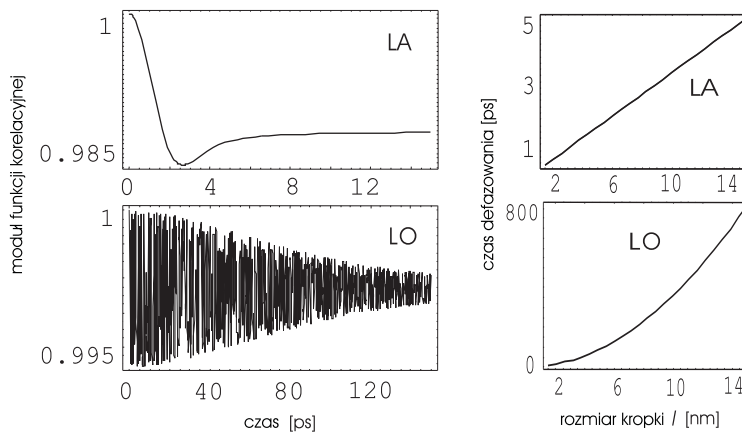
Rys. 5.5. Moduł funkcji korelacyjnej $|\langle a(t)a^+(0) \rangle|$ (miara ufności stanu podstawowego ekscytonu) względem czasu dla wzrastającej temperatury. Trzy wykresy odpowiadają małym, średnim i dużym kropkom i zawierają krzywe odnoszące się do tych samych temperatur jak na górnym wykresie. Dla małych kropek, obserwowana eksperymentalnie utrata ufności dla nieadiabatyicznie wzbudzonego ekscytonu (impulsem 0.2 ps) [89] jest dobrze odtworzona na górnym rysunku; rysunek z opracowania [27, 28].



Rys. 5.6. Typowy przebieg modułu funkcji korelacyjnej ekscytonu oddziałującego równocześnie z fononami LO i LA. Oscylacje wiążą się ze szczeliną w widmie fononów LO [mają częstotliwość $\sim 1/\Omega \sim 100$ fs], są wyraźniej silniejsze dla kropki w wyniku wzrostu efektywnej stałej Fröhlicha (górny); rysunek z opracowania [27, 28].

grupowa fononów, l — rozmiar kropki [75, 27].

W przypadku oddziaływania ekscytonu z fononami akustycznymi LA, prędkość grupowa tego modu jest stała (z powodu liniowej dyspersji), $v_g = C_a$, a to prowadzi, wg. zaproponowanego wzoru na czas defazowania, do liniowej jego zależności od l , natomiast dla fononów LA $v_g = 2\beta k \sim 2\beta/l$ (z powodu kwadratowej, w przybliżeniu), co prowadzi do kwadratowej zależności od rozmiaru kropki $\sim l^2/(2\beta)$. Pełne uzasadnienie tego wyniku przy wykorzystaniu metod funkcji Greena zostało podane w [27, 28] i będzie opisane poniżej.



Rys. 5.7. Lewy: moduł funkcji korelacyjnej przy uwzględnieniu tylko fononów LA (górny), tylko fononów LO (dolny). Prawy: czas defazowania (ubierania ekscytonu) względem uśrednionego rozmiaru kropki l dla kanału LA (górny) — jest to zależność liniowa i dla kanału LO (dolny) — zależność kwadratowa od l ; rysunek z opracowania [27, 28].

5.2 Uzasadnienie uniwersalnej metody oszacowania czasu defazowania zlokalizowanych wzbudzeń w nanostrukturach

W opracowaniu monograficznym [27] (i także w [28] oraz [29]) podana i udowodniona została uniwersalna reguła oszacowania czasu defazowania lokalnych wzbudzeń w nanostrukturze przez oddziaływanie z kolektywnymi wzbudzeniami otoczenia.

W celu oceny czasu defazowania wzbudzenia (np. ekscytonu) zlokalizowanego w kropce (lub w innej nanostrukturze) w wyniku hybrydyzacji z kolektywnymi wzbudzeniami w otaczającym materiale (np. z fononami) możemy zastosować

fenomenologiczny scenariusz oparty na wyżej przedstawionym schemacie obliczania funkcji korelacyjnej (opisującej utratę ufności) metodami funkcji Greena [75]. Funkcja korelacyjna,

$$I(t) = \langle a_0(t)a_0^\dagger(0) \rangle = -\frac{\hbar}{\pi} \int d\omega \text{Im}G_r e^{-i\omega t}, \quad (5.19)$$

(gdzie $a^{(+)}$ jest operatorem anihilacji /kreacji/ ekscytonu w kropce) pozwala ocenić charakterystyczny czas defazowania, jako czas szybkiego zmniejszania wartości jej modułu (co widać wyraźnie na rys. 5.6). Funkcja ta jest odwrotną transformatą Fouriera intensywności spektralnej (rys. 5.4), którą wyrazić można z kolei przez urojoną część retardowanej komutacyjnej jednocząstkowej funkcji Greena ekscytonu G_r [93, 94]. Dla krótkich skal czasowych (a zatem dla dużych częstotliwości fourierowskich ω) urojona część retardowanej funkcji Greena jest proporcjonalna do urojonej części operatora masowego (wynika to z równania (5.17) dla dużych ω). Operator masowy w głównym rzędzie (przy zaniedbaniu wielo-fononowych efektów zgodnie z przyjętą dokładnością) wyraża się zależnością [93, 94]:

$$\gamma \sim \int dk |F(k)|^2 \delta(\omega - E - \omega(k)), \quad (5.20)$$

z wierzchołkami oddziaływania o ogólnej postaci (oddziaływanie lokalnych stopni swobody w kropce z nielokalnymi wzbudzeniami kryształu wyrażonymi poprzez fale płaskie):

$$F(k) \sim \langle \Psi_0 | e^{ikr} | \Psi_0 \rangle, \quad (5.21)$$

gdzie $|\Psi_0(r)\rangle$ jest funkcją falową ekscytonu zlokalizowanego w kropce odpowiadającą jego stanowi podstawowemu o energii E (dla uproszczenia posługujemy się tu jednocząstkowym zlokalizowanym wzbudzeniem, np. tylko elektronem, dodatkowo w jednym wymiarze, przyjęto też $\hbar = 1$). Łatwo zauważyć, że funkcja korelacyjna

$$I(t) \sim e^{-iEt} \int dr |\Psi_0(r)|^2 \int dk F^*(k) e^{i(kr - \omega(k)t)}, \quad (5.22)$$

zapisana w ten sposób jest proporcjonalna do całki przekrycia gęstości prawdopodobieństwa stanu zlokalizowanej w kropce cząstki,

$$|\Psi_0(r)|^2, \quad (5.23)$$

z opuszczającym obszar kropki kwantowej pakietem falowym wzbudzeń kolektywnych (fononów), czyli pakietem falowym chmury fononowej,

$$\int dk F^*(k) e^{i\left(r - \frac{\partial\omega(k)}{\partial k}t\right)k} \quad (5.24)$$

(ze środkiem pakietu w przestrzeni k , $k \sim 1/l$, l jest rozmiarem kropki – co wynika z omówionego wcześniej efektu szyjki butelki, pojawiającego się tu poprzez formfaktor $F(k)$). To właśnie ten pakiet falowy unosi nadmiarową energię

ubieranej cząstki (deformacyjną LA lub polaryzacyjną LO) na zewnątrz kropki do otaczającego kryształu. Kinetyka pakietu falowego odbywa się z jego prędkością grupową $v_g = \frac{\partial \omega(k)}{\partial k}$ (dla $k \sim 1/l$). Jasne jest zatem, że czas defazowania to czas, po którym pakiet falowy opuści obszar kropki kwantowej — wtedy cała przekrycia pakietu z gęstością prawdopodobieństwa zlokalizowanej cząstki gwałtownie spadnie, a to odpowiada zatem charakterystycznemu czasowi zmniejszania wartości modułu $I(t)$. Czas ten musi być rzędu:

$$\tau \simeq \frac{l}{v_g},$$

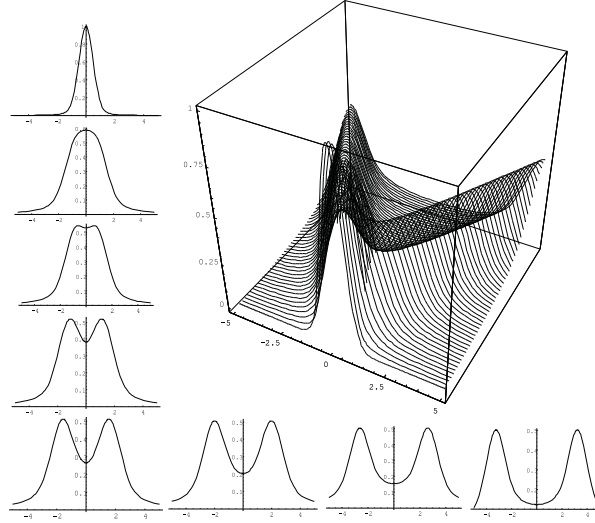
gdzie l jest uśrednionym po kierunkach rozmiarem kropki (zachowanie to zilustrowane jest na rys. 5.8 — 5.9, wg oryginalnej pracy [27, 29]).

W szczególności, na rys. 5.8 przedstawiona jest kinetyka pakietu falowego fononów akustycznych LA, opuszczającego kropkę kwantową w czasie defazowania ekscytonu [27, 29, 28]. Z kolei, na rys. 5.9 zilustrowana jest kinetyka pakietu fononów optycznych LO związana z kanałem LO defazowania ekscytonu w kropce — różnica w stosunku do kanału LA wiąże się z prędkością grupową fononowych modów LO i LA. Dla kinetyki procesu defazowania to właśnie prędkość grupowa danego modu kolektywnego jest najistotniejszą charakterystyką określającą czas dyssypacji (defazowania) kanałem wykorzystującym ten mod.

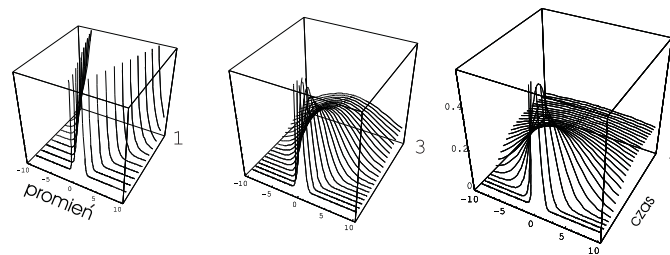
Z naszkicowanego wyżej wyprowadzenia wynika, że czas defazowania jest rzędu stosunku rozmiarów kropki l i prędkości grupowej fononów — prędkości z jaką porusza się pakiet fononów (chmura fononów), unoszący nadmiarową energię do otaczającego materiału na zewnątrz kropki kwantowej. Jest to w istocie ewolucja niestacjonarnego stanu nieadiabatycznie wzbudzonego w kropce gołego ekscytonu — stan ten cały czas jest niestacjonarny, jednakże zależna od czasu charakterystyka (ujęta tu pod postacią poruszającego pakietu falowego) unosi ze sobą niestacjonarność, a pozostawiona kropka z ubranym ekscytonem, czyli polaronem lokalnie nie podlega już zmianie czasowej. Ta bardzo trafna koncepcja sformułowania przez zespół z Politechniki Wrocławskiej została podchwyciona przez grupę Tielmana Kuhna z Münster. Zespół ten analizował zasugerowany przez nas możliwy proces powrotu pakietu falowego ewentualnie odbitego od jakiejś przeszkody, np. ścianek próbki półprzewodnikowej z kropką kwantową. Powracający pakiet falowy ponownie zaburzy stan lokalnego plazmonu w kropce i wywoła ponowny proces jego defazowania. Badania te, przeprowadzone przez zespół Kuhna w wyniku naszych sugestii, potwierdzają wielką przydatność naszego sformułowania opisu defazowania w nanostrukturach przez mody kolektywne otoczenia.

Wracając do procesu defazowania przez fonony zauważamy, że dla fononów akustycznych (LA) ich prędkość grupowa to stała — prędkość dźwięku $v_g = C_a$, co prowadzi do liniowej zależności względem rozmiaru kropki,

$$\tau \simeq \frac{l}{C_a},$$



Rys. 5.8. Kinetyka pakietu falowego fononów LA, $\mathcal{A}(r, t) = \iint e^{-ikr'} |\Psi(r')|^2 dr' e^{i(r \pm \frac{d\epsilon(|k|)}{d|k|} \text{sign}(k)t)k} dk$ (w modelu 1D) opuszczającego obszar kropki kwantowej w wyniku oddziaływania ekscyton-fonony LA — wyraźnie widoczna stała prędkość grupowa pakietu; wg pracy [27, 28].



Rys. 5.9. Kinetyka pakietu falowego fononów LO, $\mathcal{A}(r, t) = \iint e^{-ikr'} |\Psi(r')|^2 dr' e^{i(r \pm \frac{d\epsilon(|k|)}{d|k|} \text{sign}(k)t)k} dk$ (w modelu 1D) opuszczającego obszar kropki kwantowej w wyniku ubierania ekscytonu w fonony LO — na kolejnych rysunkach skale czasowe w proporcji 1:3:5; wg pracy [27, 28].

dla fononów optycznych $v_g = 2\beta k \sim 2\beta/l$ i otrzymujemy kwadratową zależność od l ,

$$\tau \simeq \frac{l}{v_g} = l \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial p} \right)^{-1} = \frac{\hbar l}{2\beta k} \simeq \frac{\hbar l^2}{2\beta},$$

ponieważ $k \simeq 1/l$ (z powodu efektu szyjki butelki taki wektor falowy określa położenie centrum pakietu fononów LO w przestrzeni pędów). W przypadku fononów optycznych LO czas defazowania skaluje się zatem kwadratowo z rozmiarem kropki i dla typowych struktur (w skali rozmiarów rzędu 10 nm) osiąga znacznie większe wartości niż w przypadku defazowania kanałem fononów LA (rys. 5.7).

5.3 Silny wzrost oddziaływania ładunkowych stopni swobody z fononami LO w nanostrukturach

Innym ważnym rezultatem zespołu z Politechniki Wrocławskiej, i związanym z dekoherencją ładunkowych stopni swobody w kropkach kwantowych wywołaną przez fonony, jest wzrost oddziaływania ładunkowych stopni swobody z fononami LO w nanostrukturach [27, 29, 80, 28].

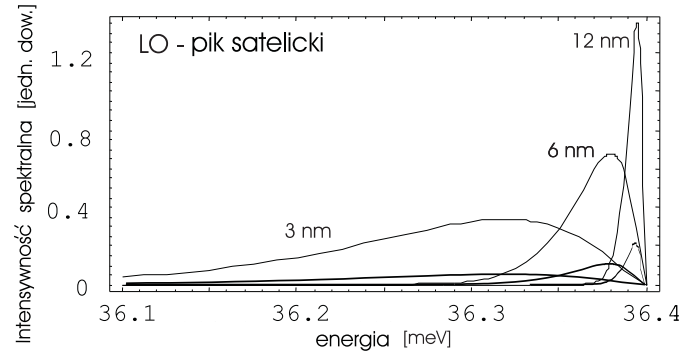
Ten silny efekt wiąże się z faktem, że oddziaływanie elektronu (lub ekscytonu) z fononami optycznymi jest przedmiotem pewnej niejednoznaczności wyboru, jaka część polaryzacji jest włączona do pola krystalicznego [77]. Poruszający się w kryształach elektron polaryzuje lokalnie kryształ, czyli wytwarza pakiet falowy fononów optycznych. Tę polaryzację można podzielić na dwie składowe: inercyjną, która jakby pozostaje w lokalnym miejscu polaryzacji i nieinercyjną, która towarzyszy poruszającemu się elektronowi.

Nieinercyjna część chmury polaryzacyjnej jest uwzględniona w definicji samego elektronu, towarzyszy bowiem poruszającemu się elektronowi i może być włączona do pola krystalicznego definiującego stany kwantowe identyfikowane z elektronami. Z kolei inercyjna część polaryzacji pozostając zlokalizowana oddziałuje z uciekającym elektronem i prowadzi do oddziaływania elektron-fonon LO. Widać zatem, że wielkość tego oddziaływania zależy istotnie od prędkości z jaką porusza się elektron — szybciej poruszający się elektron w mniejszym stopniu jest doganiany przez wywoływaną przez samego siebie chmurę polaryzacyjną i wtedy część inercyjna polaryzacji — ta która odpowiada za oddziaływanie elektron-fonon LO — jest większa.

W celu ilościowego ujęcia tego efektu można przeprowadzić następującą aproksymację. Oddziaływanie elektron-fonon LO wyraża się zwykle za pomocą bezwymiarowej stałej materiałowej, stałej Fröhlicha [77, 78]:

$$\alpha_e = \frac{e^2}{\tilde{\epsilon}} \sqrt{\frac{m^*}{2\hbar^3 \Omega}}, \quad (5.25)$$

gdzie: $\tilde{\epsilon} = (1/\epsilon_\infty - 1/\epsilon_0)^{-1}$; dla litego materiału GaAs *bulk*, $\epsilon_0 = 12.9$, $\epsilon_\infty = 10.9$, $m^* = 0.067m_e$ i $\hbar\Omega = 36$ meV, i wtedy $\alpha_e = 0.07$. Taka wartość stałej Fröhlicha



Rys. 5.10. Wzrost piku satelickiego od fononów LO w intensywności spektralnej w zależności od stałej Fröhlicha dla różnych rozmiarów kropki (dla każdego z rozmiarów kropki, górna krzywa odpowiada zrenormalizowanej stałej Fröhlicha, dolna — nie zrenormalizowanej) — stosunek intensywności piku satelickiego do intensywności piku centralnego wyraża współczynnik Huanga-Rhysa [79].

w materiale litym jest dobrze potwierdzona eksperymentalnie w GaAs *bulk* [97]. Dla elektronu zlokalizowanego w skali nanometrowej w kropce kwantowej (np. GaAs/InAs), sytuacja jest jednak odmienna. Obserwowany jest silny wzrost α_e [82]. Z niedawnych pomiarów pochłaniania przez kropkę dalekiej podczerwieni zaobserwowano dwukrotny wzrost rozszczepienia (*anti-crossing*) polaronowego widma absorpcji podczerwieni w polu magnetycznym [82], co wskazuje na dwukrotny wzrost stałej Fröhlicha w kropce, $\alpha_e \sim 0.15$ (dla kropki o rozmiarach $\sim 10-15nm$). Dla mniejszych kropek zaobserwowano jeszcze większy wzrost efektywnej stałej α_e [100, 101] na podstawie pomiaru współczynnika Huanga-Rhysa [79] (ten współczynnik wyraża stosunek intensywności piku satelickiego (LO) do głównego piku fotoluminescencyjnego widma fotoluminescencji — wzrost piku satelickiego LO dobrze widoczny jest na rys. 5.10).

Zgodnie z opisaną wyżej ideą, nieinercyjna część polaryzacji lokalnej wywołanej przez elektron w sieci, która nadąża za jego ruchem, wliczona już jest do pola krystalicznego definiującego elektron. W związku z tym, inercyjna część lokalnej polaryzacji działająca na elektron sieciowy może być przedstawiona jako: $\mathbf{P}(\mathbf{r}) = \mathbf{P}_0(\mathbf{r}) - \mathbf{P}_\infty(\mathbf{r})$, gdzie

$$\mathbf{P}_0 = \frac{\epsilon_0 - 1}{4\pi\epsilon_0} \mathbf{D}, \quad \mathbf{P}_\infty = \frac{\epsilon_\infty - 1}{4\pi\epsilon_\infty} \mathbf{D},$$

odpowiadają statycznej i wysoko-częstościowej polaryzacji (termin 'wysoko-częstościowy' odnosi się tu do częstości dużo większych niż fononowe, ale mniejszych niż częstości atomowe), \mathbf{D} jest indukcją elektrostatyczną, $\mathbf{P}(\mathbf{r}) = \mathbf{D}/(4\pi\tilde{\epsilon})$, co prowadzi następnie [77, 78] do formuły (5.25) na stałą Fröhlicha.

Dla elektronu uwięzionego w kropce *inercyjna* część polaryzacji jest większa w porównaniu do sieciowego pasmowego elektronu. Dolna granica kwaziklasycznej

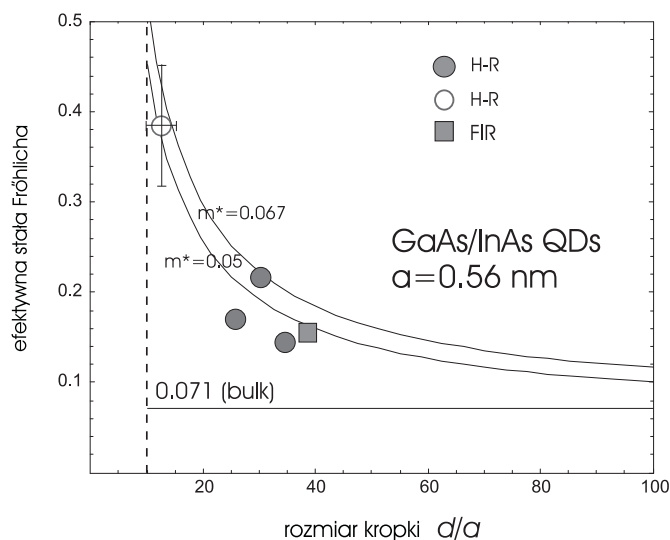
prędkości elektronu w kropce o rozmiarach d wynosi $v_d \simeq \hbar/(m^*d)$ i jest większa od prędkości elektronów sieciowych (w pobliżu punktu Γ prędkość grupowa elektronów pasmowych jest niewielka, a w samym punkcie Γ jest ona zero, z przyczyn symetrii). Dlatego *inercyjna część* polaryzacji dla elektronu w kropce wzrasta, ponieważ szybko poruszający się elektron w kropce ucieka skuteczniej przed chmurą polaryzacyjną niż elektron pasmowy. Jeśli rozmiar kropki d osiągnie skalę atomową a (a jest rozmiarem komórki elementarnej), wtedy dolna granica prędkości kwaziklasycznej elektronu osiąga również atomową skalę $v_d = v_a \simeq \hbar/(m^*a)$. W takim przypadku *inercyjna* lokalna polaryzacja wynosi \mathbf{P}_0 . Wobec tego, jeśli przyjąć, że *inercyjna część* polaryzacji wrasta proporcjonalnie do wartości (dolnej jej granicy) kwaziklasycznej prędkości elektronu, od $\mathbf{P}_0 - \mathbf{P}_\infty$ dla sieciowych elektronów, aż do \mathbf{P}_0 , dla elektronów związanych w atomach, można napisać dla tej polaryzacji: $\mathbf{P}'(\mathbf{r}) = \mathbf{P}_0(\mathbf{r}) - \eta\mathbf{P}_\infty(\mathbf{r})$, gdzie czynnik η ($0 \leq \eta \leq 1$) zależy od skali lokalizacji elektronu. Warunki graniczne oznaczają tu, że $\eta = 1$ kiedy $d \rightarrow \infty$ i $\eta = 0$ kiedy d osiąga rozmiary atomów, $d \simeq a$. Zatem, w ramach liniowej aproksymacji względem małego parametru a/d , otrzymujemy $\eta = 1 - a/d$ i dla związanego w kropce elektronu, $\mathbf{P}'(\mathbf{r}) = \mathbf{D}/(4\pi\tilde{\epsilon}')$, z efektywną stałą dielektryczną $\tilde{\epsilon}'$,

$$\frac{1}{\tilde{\epsilon}'} = \frac{1 - a/d}{\epsilon_\infty} - \frac{1}{\epsilon_0} + \frac{a}{d}.$$

W ten sposób uzyskać można zrenormalizowaną stałą Fröhlicha (5.25) z $\tilde{\epsilon}$ zamienioną przez $\tilde{\epsilon}'$.

W przypadku kropek kwantowych InAs/GaAs QD o promieniu rzędu 10 nm (czyli średnicy $d \approx 20$ nm), zrenormalizowana stała Fröhlicha wynosi ≈ 0.15 i okazuje się być w bardzo dobrej zgodności z danymi spektroskopii (*FIR spectroscopy*) [82]. Wzrost oddziaływania elektron-fonon LO prowadzi do silnego wzrostu parametru Huang-Rhysa [79], opisującego wzmocnienie intensywności satelickiego piku LO w widmie fotoluminescencji kropek (InAs/GaAs) [100, 101], jak zostało to przedstawione na rys. 5.10. Parametr Huang-Rhysa skaluje się jak α_e (dodatkowe korekty wynikają z różnicy stałej Fröhlicha dla elektronu i dziury tworzących ekscyton, z powodu różnej masy efektywne obu tych nośników). Dla kropek o średnicy $\sim 5 - 9$ nm [101], odpowiednie $\alpha_e \sim 0.4 - 0.3$, a dla kropek o średnicy $\sim 15 - 19$ nm [100], $\alpha_e \sim 0.25 - 0.18$. W pierwszym przypadku prowadzi to do czynnika 6 - 5, a w drugim 4 - 3 dla renormalizacji parametru Huang-Rhysa, co dobrze odpowiada danym doświadczalnym (rys. 5.11) [27].

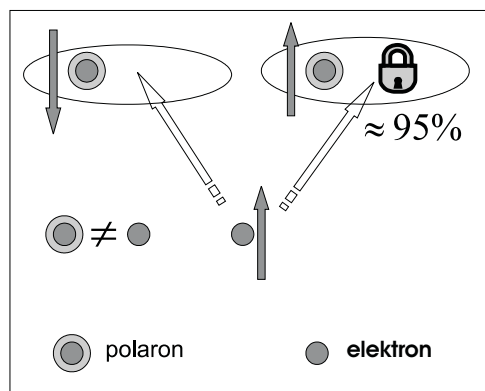
Na rys. 5.10 (wg [27]) przedstawiono także silną zależność rozmiarową piku satelickiego w intensywności spektralnej ekscytonu w kropce kwantowej wywołaną wyżej opisanym efektem.



Rys. 5.11. Efektywna stała Fröhlicha względem rozmiarów nanostruktury — kropki kwantowej typu GaAs/InAs; pełne koła: dane z parametru Huanga-Rhysa dla piramidalnych kropek o rozmiarach (długość bazy): 19,17,15 nm [100], otwarte okręgi — dane dla ekstremalnie małej kropki 5-9 nm [101] (z parametru Huanga-Rhysa), kwadrat — dane z pochłaniania podczerwieni w polu magnetycznym [82].

5.4 Czasowe ograniczenie spinowej blokady Pauliego przez defazowanie fononowe

Kolejnym rezultatem zespołu z Politechniki Wrocławskiej [29, 76, 27, 28] związanym z defazowaniem orbitalnych stopni swobody w kropkach kwantowych poprzez fonony z otoczenia jest efekt natury spinowej. Opisana wyżej inercja procesu tworzenia polaronu, czyli ubierania gołego ekscytonu w chmurę fononów, powoduje czasowe ograniczenie wykluczającej zasady Pauliego, według której na jednym poziomie elektronowym w kropce (np. na poziomie podstawowym) nie mogą zmieścić się dwa elektrony z tą samą orientacją spinu, ale mogą zmieścić się dwa elektrony o przeciwnej orientacji spinów (jak schematycznie przedstawiono to na rys. 5.12). Spinowa blokada Pauliego może być jednak czasowo uchylona w pewnym stopniu, jeśli elektron znajdujący się w kropce jest już ubrany w chmurę fononową. Jest on wtedy polaronem, a zatem inną cząstką (kwazicząstką) niż goły elektron, który może być wzbudzany nieadiabatywnie (tzn. subpicosekundowo) do kropki. Zasada wykluczająca Pauliego dotyczy jednak identycznych cząstek, a różnica między dwoma cząstkami: polaronem i gołym elektronem to chmura



Rys. 5.12. Schematyczne przedstawienie czasowego ograniczenia spinowej blokady Pauliego w kropkach kwantowych w wyniku defazowania ładunków przez fonony: nieadiabatywnie (szybko) wzbudzony do kropki elektron jest gołą cząstką, inną (z dokładnością 5-10%) w stosunku do ubranego w fonony polaronu, co prowadzi do częściowego i czasowego (do momentu defazowania elektronu) uchylenia dokładności spinowej blokady Pauliego (strzałki — orientacje spinu); rysunek wg [27, 28].

fononowa polaronu. To ubranie, czyli chmura fononowa, jest wystarczającą różnicą między obiema cząstkami, by naruszyć blokadę Pauliego. Dla polaronów w kropkach powoduje ona uchylenie blokady w granicach 10% (jest to miara różnicy wywołanej chmurą fononową polaronu), tzn. wzbudzony nieadiabatywnie goły elektron w około 10% zmieści się ('wepchnie się' do kropki) na stanie kwantowym w kropce już zajętej przez polaron o takim samym spinie. Po upływie czasu defazowania — czyli ubierania elektronu w chmurę fononów zostanie on jednak w całości wyrzucony ('wypchnięty') z tego stanu — zgodnie z przywróconą już wtedy zasadą Pauliego.

Efekt czasowego uchylenia dokładności blokady Pauliego powoduje istotny błąd kwantowych procedur typu *spin-charge conversion* proponowanych dla hybrydowych rozwiązań bramek kwantowych [102], w których rozważa się szybkie przetwarzanie (sterowanie splątaniem qubitów) na orbitalnych stopniach swobody w kropkach, a przechowywanie na odporniejszych spinowych qubitach. By uniknąć tego błędu należy procedury *spin-charge conversion* wykonywać adiabatywnie, a to oznacza spowolnienie ponownie poniżej wymagań kryterium DiVincenzo.

Ciekawą uwagą wykraczającą poza zakres opisany poprzednio [29, 27, 28] jest zauważenie, że ubieraniu ekscytonów lub elektronów w fonony przypisać można obrazek tworzenia kolektywnego stanu – kwazicząstki. Podobnie zresztą przebiega proces ubierania elektronu lub protonu (lub innej naładowanej cząstki) w fotony i tworzenie polarytonu, który jest elektro-magnetycznym analogiem fononowego

polaronu. W obu przypadkach ubieranie odbywa się niesymetrycznie. Goła pojedyncza cząstka — np. elektron — ubiera się w liczne mody kolektywne, a więc w liczne cząstki — kwanty oddziaływania deformacyjnego, polaryzacyjnego czy też elektro-magnetycznego. Kwanty oddziaływań są zawsze bozonami i ta okoliczność jest tu sprzyjająca. Ubranie w bozony nie zmienia bowiem statystyki wyjściowej cząstki, fermionu w przypadku elektronu, czy protonu lub bozonu, w przypadku ekscytonu. Ubranie w chmurę fermionów byłoby mniej uzasadnione — statystyka kompleksu zależałaby wtedy od ilości cząstek w ubraniu. Powyższa uwaga wskazuje na możliwy argument, dlaczego cząstki oddziaływania są bozonami a nie fermionami, co może mieć szersze znaczenie wobec braku innej argumentacji w ramach fizyki cząstek elementarnych.

Rozdział 6

Defazowanie spinowych stopni swobody w kropkach kwantowych w otoczeniu magnetycznym

Rozdział ten zawiera szerokie przedstawienie formalizmu rozwiniętego przez zespół z Politechniki Wrocławskiej dla opisanego i zbadania defazowania spinu w kropkach kwantowych w otoczeniu magnetycznym. Podobnie jak rozdział 5 w odniesieniu do orbitalnych stopni swobody, przedstawiona tu będzie teoria sformułowana wcześniej w pracach oryginalnych i w opracowaniach monograficznych [29, 27, 28], także przy pewnym udziale autora.

Spinowe stopnie swobody nie oddziałują bezpośrednio z fononami, co oznacza, że nie fonony są odpowiedzialne za defazowanie spinu wzbudzeń w kropkach kwantowych. Spin nośnika uwięzionego w kropce kwantowej może podlegać zaburzeniom w wyniku:

1. sprzężenia spin-orbita z orbitalnymi stopniami swobody, które z kolei ulegają silnej dekoherencji np. fononowej, jak opisane to zostało w poprzednim rozdziale,
2. oddziaływaniem ze spinami jądrowymi materiału kropki i otoczenia,
3. z polem magnetycznym, także wewnętrznym, pochodzącym od magnetycznych domieszek lub od magnetycznie uporządkowanych faz otoczenia.

Dwa pierwsze czynniki prowadzą do słabej dekoherencji spinu w kropkach kwantowych z uwagi na niewielką wartość oddziaływania spin-orbita i podobnie niewielkie sprzężenie ze spinami jądrowymi. Stąd wynikło przekonanie, że spiny nośników w kropkach kwantowych mogły by być wykorzystane jako qubity dla

schematów QIP, wobec ich większej odporności na dekoherencję w porównaniu z orbitalnymi stopniami swobody nośników i wzbudzeń w kropkach. Warto tu jednak od razu zauważyć, że względnie powolna i niewielka dekoherencja spinu w kropkach wynika z niewielkiego oddziaływania tego spinu z otoczeniem. Ta niewielka wartość oddziaływań spinowych ogranicza jednak też możliwości sterowania spinowym qubitem i charakterystyczne czasy tego sterowania można oszacować z zasady nieoznaczoności energia-czas. Dostrzec można zatem, że czasy sterowania zarówno jedno-qubitowych jak i dwu-qubitowych bramek spinowych będą znacznie dłuższe niż odpowiednie charakterystyczne czasy sterowania orbitalnymi stopniami swobody, silnie sprzęgających się z otoczeniem. Ta niekorzystna sytuacja powoduje, że przewaga spinowych qubitów jest tylko pozorna. Jeśli jednak zauważyć, że sterowanie spinami sprowadza się w istocie do sprzężenia z polem sterującym poprzez człon Pauliego (dla qubitu zorganizowanego na z -towym kierunku spinu, pole sterujące może być zorientowane w kierunku poprzecznym, np. x -owym, z powodu własności komutacyjnych macierzy Pauliego wchodzących do członu paramagnetycznego Pauliego w hamiltonianie, $g\mu_B s_z B$, g — czynnik giromagnetyczny, μ_B — magneton Bohra, B — natężenie pola magnetycznego w kierunku z , s_z — operator z -towej składowej spinu). Jednakże, zwłaszcza w półprzewodnikach, wielkość członu Pauliego, regulowana przez czynnik giromagnetyczny g , jest raczej nieznacząca — np. w GaAs, pole magnetyczne powoduje rozszczepienie Zeemana rzędu 0.1 meV/T, co jest bardzo małą wielkością. Wynika stąd konkluzja, że sterowanie spinem w kropkach będzie powolne i ponownie, podobnie jak w przypadku orbitalnych stopni swobody, nie uda się osiągnąć poziomu stosunku czasu sterowania do czasu dekoherencji wymaganego przez kryteria DiVincenzo. Potwierdzeniem tego poglądu jest brak postępu w eksperymentalno-technologicznym zakresie praktycznej realizacji spinowych bramek w technologii kropek kwantowych.

W tym rozdziale przedstawiona zostanie teoria defazowania spinu w kropce kwantowej w wyniku oddziaływania na ten spin magnetycznego otoczenia kropki, a w szczególności popularnych ostatnio półmagnetycznych półprzewodników, badanych intensywnie eksperymentalnie i teoretycznie głównie w Polsce w IF PAN w Warszawie. Magnetyczne półprzewodniki stały się szczególnie interesujące, gdy zauważono możliwość sterowania prądowymi czynnikami ich magnetycznymi własnościami. Stosunkowo wysokie temperatury ferromagnetycznego przejścia (rzędu 100 K) wywoływane pośredniczącymi dziurami w magnetycznych półprzewodnikach, wskazywały na atrakcyjność tych materiałów dla zastosowań spintronicznych i dla QIP w nanostrukturach (kropkach kwantowych) wytwarzanych w otoczeniu półmagnetycznego półprzewodnika.

Zbadanie defazowania spinu w takich kropkach jest ważną kwestią także z punktu widzenia kropek II rodzaju, gdyż struktury takie, a zwłaszcza kropki zadawane ogniskowaniem elektrostatycznym mogą być wykonywane praktycznie w

cienkich studniach kwantowych półprzewodników półmagnetycznych, stwarzając w ten sposób bardzo bogatą i elastyczną, co sterowania i parametrów, nanostrukturę o ciekawych możliwych zastosowaniach (np. źródło koherentnych spinowo elektronów).

Jak wspomniano wyżej, z powodu małej wartości współczynnika giromagnetycznego w półprzewodnikach, sterowanie spinowym qubitami (rozpiętym na dwóch orientacjach spinu w zewnętrznym stałym polu magnetycznym) poprzez oscylacje Rabiego jest powolne i ponownie trudno jest spełnić kryteria DiVincenzo. Można jednak rozważyć próbę przyspieszenia jedno-qubitowych operacji spinowych. Propozycja [27] polega na wykorzystaniu silnego wzmocnienia współczynnika giromagnetycznego w półprzewodnikach domieszkowanych magnetycznie (czyli w półprzewodnikach półmagnetycznych) [103, 104, 105, 106, 107, 108, 109], w ich fazie uporządkowanej magnetycznie. W takich materiałach następuje przejście do fazy magnetycznie uporządkowanej, na skutek magnetycznej pośredniczącej roli pasmowych dziur [106]. Przejście to obserwowane jest eksperymentalnie w temperaturach nawet powyżej 100K (w Ga(Mn)As) [106, 107] i może być sterowane koncentracją dziur w półprzewodniku [105, 104, 110, 111, 112]. W fazie magnetycznie uporządkowanej powstaje w materiale półmagnetycznego półprzewodnika wewnętrzne pole magnetyczne typu pola Weissa o dużej wartości. Należy tu podkreślić, że pole to działa wyłącznie na spinowe stopnie swobody, ale nie działa orbitalnie, tzn. nie powoduje przesunięcia pędu kinematycznego. Pole Weissa bardzo silnie wzmacnia zatem człon Pauliego, czyli zwiększa istotnie efektywny współczynnik giromagnetyczny. Można więc oczekiwać, że w kropkach kwantowych umieszczonych w półprzewodniku półmagnetycznym (a takie struktury są osiągalne technologicznie) można znacznie przyspieszyć operacje jedno-qubitowe, być może nawet do poziomu wymaganego przez kryteria DiVincenzo. Rzecz w tym, że w otoczeniu magnetycznym dekoherencja spinu też przyspiesza i pojawia się bardzo istotne pytanie, czy rzeczywiście półprzewodniki półmagnetyczne mogą być przydatne dla osiągnięcia warunków nakładanych przez kryteria DiVincenzo.

Łatwo dostrzec, że pojawia się tu dodatkowy problem — włączenie nowego podukładu spinowego magnetycznych domieszek półmagnetycznego półprzewodnika wprowadza możliwość nowych pasmowych wzbudzeń kolektywnych — magnonów, czyli fal spinowych, a te bezpośrednio oddziałują ze spinami nośników, czy wzbudzeń w kropkach. Wydaje się jasne, że fale spinowe (magnony) przejmują w tym układzie rolę fononów i prowadzą, w związku z tą analogią, do podobnych efektów dekoherencji, jak fonony w odniesieniu do orbitalnych stopni swobody w kropkach.

Pełna analiza tego problemu — [27, 113, 114, 29, 28] — pokazuje, że fale spinowe propagujące się w uporządkowanej magnetycznie fazie półprzewodnika półmagnetycznego wywołują silną dekoherencję spinu w kropce kwantowej i to

w czasie rzędu 500-1000 ps, a więc znowu wyjątkowo niekorzystnie z punktu widzenia możliwości konstrukcji spinowej bramki logicznej komputera kwantowego (ponownie, analogicznie jak w przypadku ładunków i fononów, w samym środku okna 6 rzędów między czasami sterowania a dekoherencją amplitudową, co praktycznie uniemożliwia spełnienie kryteriów DiVincenzo).

Najważniejsze elementy tej analizy to:

- uśrednienie po losowych położeniach domieszek [115], co pozwala na znalezienie finalnie widma fal spinowych w reprezentacji Holsteina-Primakoffa [116, 117] [uśrednienie pozwala na przywrócenie efektywnie translacyjnej niezmienniczości [115] i wykorzystanie reprezentacji pędowej],
- określenie dyspersji fal spinowych w zależności od koncentracji dziur i domieszek magnetycznych [114],
- określenie struktury oddziaływania fal spinowych ze spinem ekscytonu w kropce [113].

Kluczowym elementem było zidentyfikowanie fal spinowych w półmagnetycznym półprzewodniku i określenie ich dyspersji. Jest to oryginalne osiągnięcie zespołu z Politechniki Wocławskiej [27, 28], ponieważ poprzednie stosunkowo szerokie badania opisywane w literaturze koncentrowały się głównie na temperaturze krytycznej przejścia magnetycznego, gdzie rola fal spinowych nie była istotna. Należy tu podkreślić, że znaleziona w wyniku tej analizy [27, 28] kwadratowa dyspersja fal spinowych jest najistotniejszym uwarunkowaniem szybkości wywoływanej przez nie dekoherencji fazowej. Jeśli posłużyć się uniwersalną oceną czasu defazowania, jak zostało to przedstawione w poprzednim rozdziale, jako stosunku rozmiaru kropki do prędkości grupowej modów kolektywnych otoczenia, w tym przypadku fal spinowych, czyli, $v_g = \nabla\epsilon(\mathbf{p}) \sim p \sim \frac{\hbar}{d}$, zauważamy, że czas defazowania spinu, $\tau \sim \frac{d}{1/d} \sim d^2$ skaluje się jak kwadrat rozmiaru kropki (oznaczanego przez d). Jest to zachowanie podobne jak w przypadku defazowania ładunków w kropkach przez fonony LO. Wobec kwadratowej zależności od rozmiaru kropki, czas ten narasta szybko wraz z d (czyli z rozmiarem kropki) i dla typowych kropek rozmiaru około 10 nm, osiąga wartość rzędu 500 ps.

Spotykamy się tu zatem z niekorzystną zbieżnością ocen dekoherencji fazowej, która zarówno dla orbitalnych jak i spinowych stopni swobody w kropkach kwantowych (w tym ostatnim przypadku — w półmagnetycznych półprzewodnikach) lokuje się w samym środku okna 6 rzędów między czasami operacji, a czasami dekoherencji amplitudowej — relaksacji i w ten sposób wydaje się wykluczać raczej możliwości implementacji skalowanych bramek z korektą błędów (czyli budowy dużego komputera kwantowego z korektą błędów w technologii kropek). Jest to być może przejawem głębszej — nie sformułowanej jeszcze do końca — prawidłowości, że powyższe cechy defazowania odzwierciedlają zasadniczy fakt, że to samo oddziaływanie, które umożliwia sterowanie, odpowiada

równocześnie za dekoherencję (i w najlepszym wypadku można osiągnąć połowę wymagań DiVincenzo). Biorąc pod uwagę podobne ograniczenia i w innych możliwych układach (spułapkowane jony, NMR) [23], wydaje się, że dla konstrukcji skalowalnego (dużego) komputera kwantowego potrzebne będą nowe (o mniejszej redundancji) schematy kwantowej korekty błędów, jeśli są one w ogóle możliwe, lub nielokalne, topologiczne lub kolektywne, bardziej odporne na dekoherencję rozwiązania [118, 21].

6.1 Fale spinowe w półprzewodniku półmagnetycznym

Ferromagnetyzm indukowany przez pasmowe nośniki [103, 104] w półmagnetycznych półprzewodnikach [105, 106, 107, 108, 109, 111, 112] (DMS, *diluted magnetic semiconductor*) zaobserwowano między innymi w *p*-domieszkowanych półprzewodnikach $\text{III}_{1-x}\text{Mn}_x\text{V}$ (np. $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$) oraz $\text{II}_{1-x}\text{Mn}_x\text{VI}$ (np. $\text{Zn}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Se}$), w których kationy są częściowo zastąpione jonami metalu przejściowego (Mn^{2+}). Z powodu zainteresowania głównie temperaturą krytyczną przejścia do fazy magnetycznie uporządkowanej, koncentrowano się głównie na opisach przy pomocy różnych wariantów teorii średniego pola, włączając modyfikacje modelu RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida) [106, 107, 108, 109, 111]. formalizm typu średniego pola opisuje dobrze ferromagnetyczne uporządkowanie w DMS [106, 111, 119, 120], ale prowadzi też często do zawyżenia oceny teoretycznej stabilności uporządkowanej fazy. Nieuwzględniane w prostych modelach średnio-polowych fluktuacje termiczne i kwantowe, niszczą jednak daleki porządek i prowadzą do obniżenia temperatury krytycznej. Próby ujęcia tych efektów były przeprowadzane przy wykorzystaniu metody całek funkcjonalnych w schemacie RKKY [121, 122, 123], a także numerycznie, jak np. numeryczne przybliżenie faz chaotycznych RPA [124] (*random phase approximation*) lub metody Monte-Carlo [125].

Dla potrzeb teoretycznego opisu spinowego układu w DMS przyjmuje się standardowo model wymiennego oddziaływania spinów domieszek za pośrednictwem spinów dziur pasmowych [106, 111, 121, 122]. Pośredniczące oddziaływanie wymienne typu *p* – *d* pomiędzy magnetyczną domieszką i dziurą prowadzi do ferromagnetycznego uporządkowania magnetycznych domieszek, mimo znacznych odległości między magnetycznymi domieszkami (wobec koncentracji zaledwie kilku procent) i małej, w związku z tym, bezpośredniej magnetycznej wymiany między domieszkami. Pasmowe dziury uczestniczące w tym pośredniczonym oddziaływaniu wzmacniają silnie ferromagnetyczne skośne oddziaływanie wymienne domieszek, które dominuje nad początkowo antyferromagnetycznym oddziaływaniem wymiennym prostym samych domieszek [105]. To skośne sprzężenie dla niewielkiej nawet koncentracji dziur (zwykle mniejszej niż koncentracja domieszek) jest tak silne, że temperatura krytyczna przejścia ferromagnetycznego w DMS

osiąga duże wartości (szczególnie wysokie, $T_c \sim 110$ K, dla $\text{Ga}_{0.947}\text{Mn}_{0.053}\text{As}$ [106, 126, 127], i nieco wyższe dla GaN domieszkowanego Mn [128, 129]). Należy tu zauważyć, że w materiałach $\text{III}_{1-x}\text{Mn}_x\text{V}$, atomy Mn są równocześnie magnetycznymi domieszkami i płytkami akceptorami (dostarczającymi pośredniczących dziur pasmowych). Jest to przyczyną stosunkowo wysokiej temperatury krytycznej w tych materiałach [106], jak również kwazi-metalicznego stanu kolektywnego dziur w niskich temperaturach. W innych półmagnetycznych półprzewodnikach, a mianowicie w materiałach $\text{II}_{1-x}\text{Mn}_x\text{VI}$ domieszki manganu nie są akceptorami i dodatkowe p-domieszkowanie jest konieczne dla umożliwienia pośredniczonej magnetycznej wymiany. W takich materiałach możliwe jest niemetaliczne zachowanie dziur w niskich temperaturach (z powodu głębszych akceptorowych centrów i szybkiej lokalizacji dziur na akceptorach, co niszczy kolektywny stan kwazimetaliczny dziur).

Jak zostało wykazane w pracy [114] w DMS w niskich temperaturach niskoenergetyczne efektywne wzbudzenia spinowe mają charakter fal spinowych.

Dla zilustrowania tego podejścia podać można wyjściowy Hamiltonian opisujący układ DMS [105, 106, 121, 122]:

$$\hat{H} = \hat{H}_s + \hat{H}_p. \quad (6.1)$$

gdzie \hat{H}_s opisuje spinowy podukład DMS (w słabym zewnętrznym polu magnetycznym $\mathbf{B} = (0, 0, B)$):

$$\begin{aligned} \hat{H}_s = & -g_p\mu_B B \sum_{j=1}^{N_p} s_{zj} - g_0\mu_B B \sum_{\mathbf{n}} S_{z\mathbf{n}} \\ & -2 \sum_{j=1}^{N_p} \sum_{\mathbf{n}} A_p(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{\mathbf{n}}) \hat{\mathbf{s}}_j \cdot \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{n}}, \end{aligned} \quad (6.2)$$

oznaczenia $\hat{\mathbf{s}}_j$, \mathbf{R}_j i $\hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{n}}$, $\mathbf{R}_{\mathbf{n}}$ odnoszą się do operatorów spinu i położenia j -tej dziury i \mathbf{n} -tego atomu domieszki (w punkcie sieci $\mathbf{R}_{\mathbf{n}}$), odpowiednio; wyrażenie, $A_p(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{\mathbf{n}})$ jest całką wymiany typu $p - d$: $A_p(\mathbf{R}) < 0$ (czyli jest antyferromagnetycznego typu) i $|A_p(\mathbf{R})| \sim 1eV$ (czyli jest to sine oddziaływanie); g_p i g_0 są czynnikami Landego (czynnikami giromagnetycznymi) dla dziury pasmowej i dla atomu domieszki; $\mu_B = \frac{\hbar|e|\hbar}{2m_0c}$ to magneton Bohra; sumowanie po \mathbf{n} przebiega po zajętych przez domieszki węzłach; koncentracja dziur $x_p = \frac{N_p}{N}$, koncentracja domieszek magnetycznych $x = \frac{N_i}{N}$, N_p oznacza liczbę pasmowych dziur, które uczestniczą w wymianie spinowej, N_i oznacza liczbę magnetycznych domieszek, N jest tu liczbą komórek elementarnych w kryształ DMS.

\hat{H}_p jest fermionowym hamiltonianem dziur. Hamiltonian ten może być przedmiotem modelowania struktury DMS różnych typów, np. typu III(Mn)V, kiedy jony Mn^{2+} są równocześnie centrami akceptorowymi, lub typu II(Mn)VI, dla których dodatkowe centra akceptorowe muszą być wprowadzone.

Ważnym wymogiem prowadzonej analizy jest analityczny jej charakter, co pozwoli następnie na wyliczenie explicite prędkości grupowej magnonów, niezbędnej

dla oszacowania czasu defazowania spinu ekscytonu w kropce kwantowej. W celu zachowania analitycznego sformułowania [114] ograniczono się tu do jednopasmowego modelu dziur, odwołując się do granicznych typów niskotemperaturowego ich zachowania:

- dla płytkich akceptorów — kwazi-metaliczny stan podstawowy dziur (skolektywizowane dziury) ($T=0$),
- dla głębszych akceptorów — izolatorowy stan podstawowy dziur (zlokalizowane dziury) ($T=0$).

W drugim przypadku dziury wiążą się z akceptorami (w stanie podstawowym) przy warunku, że koncentracja akceptorów jest dostatecznie mała, żeby separacja orbit dziurowych była dużo większa niż same orbity, chociaż orbity te powinny być dostatecznie duże, by obejmować wystarczająco wiele centrów magnetycznych (dlatego o większej koncentracji od koncentracji akceptorów i dziur, $x_p < x$).

W pracy [114] została przeprowadzona się uśrednienie po przypadkowych rozkładach domieszek magnetycznych i akceptorów w DMS wykorzystując reprezentację Holsteina - Primakoffa [116, 117] (HP).

Przybliżenie HP umożliwia wyrażenie spinowych stopni swobody poprzez operaty drugiego kwantowania dla zbudzeń magnonowych ponad stanem podstawowym magnetycznie uporządkowanej fazy. Jeśli założyć, że stan podstawowy spinów domieszek odpowiada ich ułożeniu wzdłuż kierunku zewnętrznego pola magnetycznego [121], wtedy $\hat{S}_{+\mathbf{n}} = \sqrt{2S - \hat{B}_{\mathbf{n}}^+ \hat{B}_{\mathbf{n}} \hat{B}_{\mathbf{n}}} \simeq \sqrt{2S} \hat{B}_{\mathbf{n}}$, $\hat{S}_{-\mathbf{n}} = \hat{B}_{\mathbf{n}}^+ \sqrt{2S - \hat{B}_{\mathbf{n}}^+ \hat{B}_{\mathbf{n}}} \simeq \sqrt{2S} \hat{B}_{\mathbf{n}}^+$, $\hat{S}_{z\mathbf{n}} = -S + \hat{B}_{\mathbf{n}}^+ \hat{B}_{\mathbf{n}}$, gdzie $\hat{B}_{\mathbf{n}}^{(+)}$ oznaczają operatory bozonowe HP [116, 117] dla domieszek ($\hat{S}_{\pm\mathbf{n}} = \hat{S}_{x\mathbf{n}} \pm i\hat{S}_{y\mathbf{n}}$). Zakłada się także [121], że całkowity spin dziur jest mniejszy od całkowitego spinu domieszek i z powodu ujemnej i dużej wartości całki wymiany $p - d$, jego ustawienie przeciwnie do pola magnetycznego wydaje się dobrze przybliżać stan podstawowy spinowego podukładu dziur (podobnie jak w ferrimagnetyku). W związku z tym, $\hat{s}_{+j} = \sqrt{1 - \hat{b}_j^+ \hat{b}_j \hat{b}_j} \simeq \hat{b}_j$, $\hat{s}_{-j} = \hat{b}_j^+ \sqrt{1 - \hat{b}_j^+ \hat{b}_j} \simeq \hat{b}_j^+$, $\hat{s}_{zj} = \frac{1}{2} - \hat{b}_j^+ \hat{b}_j$, gdzie $\hat{b}_j^{(+)}$ to bozonowe operatory HP dla dziur ($\hat{s}_{\pm j} = \hat{s}_{xj} \pm i\hat{s}_{yj}$).

W niskich temperaturach ograniczamy się tylko do głównych członów w reprezentacji HP. Wtedy hamiltonian \hat{H}_s przyjmuje postać:

$$\begin{aligned} \hat{H}_s = & E_s + \sum_{\mathbf{n}} P_{\mathbf{n}} \hat{B}_{\mathbf{n}}^+ \hat{B}_{\mathbf{n}} + \sum_{j=1}^{N_p} Q_j \hat{b}_j^+ \hat{b}_j \\ & - \sum_{j=1}^{N_p} \sum_{\mathbf{n}} C_{j,\mathbf{n}} \left(\hat{b}_j \hat{B}_{\mathbf{n}}^+ + \hat{b}_j^+ \hat{B}_{\mathbf{n}} \right), \end{aligned} \quad (6.3)$$

gdzie:

$$\begin{aligned}
 P_{\mathbf{n}} &= -g_0\mu_B B - \frac{v_0}{(2\pi)^3} \int \tilde{A}_p(\mathbf{k}) \sum_j e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{\mathbf{n}})} d^3k, \\
 Q_j &= g_p\mu_B B - 2S \frac{v_0}{(2\pi)^3} \int \tilde{A}_p(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{n}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{\mathbf{n}})} d^3k, \\
 C_{j,\mathbf{n}} &= \sqrt{2S} \frac{v_0}{(2\pi)^3} \int \tilde{A}_p(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{\mathbf{n}})} d^3k, \\
 E_s &= g_0\mu_B S N_i B - g_p\mu_B N_p B / 2 \\
 &+ S \frac{v_0}{(2\pi)^3} \int \tilde{A}_p(\mathbf{k}) \sum_{j=1}^{N_p} \sum_{\mathbf{n}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{\mathbf{n}})} d^3k,
 \end{aligned} \tag{6.4}$$

E_s jest tu energią stanu podstawowego spinowego podukładu DMS;

$$\tilde{A}_p(\mathbf{k}) = \frac{1}{v_0} \int d^3k A_p(\mathbf{R}) \exp(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}),$$

oraz $v_0 = V/N$ oznacza tu objętość komórki elementarnej.

Dla kompletności przedstawianej ilustracji przedstawimy poniżej metodę uśrednienia po losowych rozkładach domieszek zaczerpniętą z prac [27, 28]. Ten element analizy warty jest podkreślenia gdyż prowadzi do przywrócenia pędowej reprezentacji dla magnonów, mimo że układ DMS z losowo rozmieszczonymi domieszkami może nie być idealnie translacyjnie niezmienniczy.

6.1.1 Metoda uśredniania po losowych rozkładach domieszek

Przypadkowy rozkład domieszek magnetycznych w materiale DMS jest główną przyczyną braku wcześniejszych wystarczających analiz dotyczących fal spinowych w półprzewodnikach półmagnetycznych. Poprzednie analizy tego problemu, jak opisano szczegółowo w [27, 28], posiłkowały się zwykle numerycznym uwzględnianiem losowości rozkładu domieszek magnetycznych w DMS, a to nie pozwalało już na wyniki w postaci analitycznej. Konieczne było zatem uśrednienie po przypadkowych rozkładach w wersji analitycznej. Zostało to oryginalnie przeprowadzone w pracy [114] według następującego schematu.

Dla $N_i \ll N$ można przyjąć losowy rozkład domieszek w kryształach i zaniedbać rozmiary komórki elementarnej, tzn. przejść do modelu ciągłego, kiedy $V, N_i, N \rightarrow \infty$ (przy warunku $x = const$, $v_0 = V/N = const$). Wówczas, $\int d^3R_1 \dots d^3R_{N_i} P(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_{N_i}) = 1$, gdzie $P(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_{N_i})$ jest gęstością prawdopodobieństwa dla konfiguracji domieszek $(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_{N_i})$. Jeśli teraz rozważać wielkość $A(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_{N_i})$ będącą dowolną funkcją zależną od konfiguracji domieszek, wtedy uśrednienie po wszystkich możliwych konfiguracjach sprowadza się do:

$$\begin{aligned}
 &\overline{A(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_{N_i})} \\
 &= \int_V d^3R_1 \dots d^3R_{N_i} A(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_{N_i}) P(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_{N_i}).
 \end{aligned} \tag{6.5}$$

Dla szczególnego przypadku, kiedy A jest postaci

$$A(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_{N_i}) = \sum_{\mathbf{n}_1 \neq \dots \neq \mathbf{n}_s} a(\mathbf{R}_{\mathbf{n}_1}, \dots, \mathbf{R}_{\mathbf{n}_s}),$$

gdzie suma przebiega po zajętych przez domieszki punktach sieciowych $\mathbf{n}_1, \dots, \mathbf{n}_s$ dla konkretnej konfiguracji domieszek [zauważmy tu, że w szczególności energia potencjalna domieszek jest funkcją należącą do tej klasy zależności,

$$U(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_{N_i}) = \sum_{\mathbf{n}_1 \neq \mathbf{n}_2} u(\mathbf{R}_{\mathbf{n}_1} - \mathbf{R}_{\mathbf{n}_2})]$$

można zapisać,

$$\begin{aligned} & \int_V d^3 R_1 \dots d^3 R_{N_i} P(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_{N_i}) \sum_{\mathbf{n}_1 \neq \dots \neq \mathbf{n}_s} a(\mathbf{R}_{\mathbf{n}_1}, \dots, \mathbf{R}_{\mathbf{n}_s}) \\ &= \int d^3 R_1 \dots d^3 R_s a(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_s) \\ & \times \frac{\sum_{\mathbf{n}_1 \neq \dots \neq \mathbf{n}_s} \delta(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_{\mathbf{n}_1}) \dots \delta(\mathbf{R}_s - \mathbf{R}_{\mathbf{n}_s})}{\left(\frac{x}{v_0}\right)^s \int_V d^3 R_1 \dots d^3 R_s a(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_s) F_s(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_s)}, \end{aligned} \quad (6.6)$$

gdzie [115]

$$\begin{aligned} & F_s(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_s) \\ &= \left(\frac{V}{N}\right)^s \left(\frac{N}{N_i}\right)^s \frac{\sum_{\mathbf{n}_1 \neq \dots \neq \mathbf{n}_s} \delta(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_{\mathbf{n}_1}) \dots \delta(\mathbf{R}_s - \mathbf{R}_{\mathbf{n}_s})}{\sum_{\mathbf{n}} \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}_{\mathbf{n}})} \cdot \end{aligned}$$

Wprowadzona tu funkcja opisuje gęstość prawdopodobieństwa rozlokowania s domieszek w punktach $\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_s$. Dla $s = 1$ to prawdopodobieństwo wynosi $\frac{N_i}{N}$ (nie zależy od \mathbf{R} , ponieważ założyliśmy ekwiwalentność wszystkich węzłów), zatem $\frac{\sum_{\mathbf{n}} \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}_{\mathbf{n}})}{N} = \frac{N_i}{N} = \frac{x}{v_0}$ i $F_1 = 1$. Ponieważ $|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j| \rightarrow \infty$, $F_s(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_s) \rightarrow F_1(\mathbf{R}_1) \dots F_s(\mathbf{R}_s)$ to $F_s(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_s) = 1 + g_s(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_s)$ i $g_s(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_s) \rightarrow 0$, dla $|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j| \rightarrow \infty$.

6.1.2 Diagonalizacja efektywnego spinowego hamiltonianu dla DMS

Przestawiony wyżej schemat uśrednienia został następnie zastosowany do rozważanego modelu DMS. Po przeprowadzeniu uśrednienia po przypadkowych położeniach domieszek [114] wykonana została diagonalizację (Bogolubova) hamiltonianu $\hat{H}_s(\mathbf{k})$, czyli hamiltonianu spinowej części układu w reprezentacji pędowej, której wprowadzenie możliwe było dopiero po uśrednieniu po losowych położeniach domieszek [114]. Diagonalizacja Bogolubova przeprowadzona została jawnie poprzez transformacje liniową operatorów: $\hat{B}(\mathbf{k}) = v_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_1(\mathbf{k}) + u_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_2(\mathbf{k})$, $\hat{b}(\mathbf{k}) = u_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_1(\mathbf{k}) - v_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_2(\mathbf{k})$, ($u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = 1$). W wyniku otrzymano:

$$\hat{H}_s(\mathbf{k}) = \varepsilon_1(\mathbf{k}) \hat{\alpha}_1^+(\mathbf{k}) \hat{\alpha}_1(\mathbf{k}) + \varepsilon_2(\mathbf{k}) \hat{\alpha}_2^+(\mathbf{k}) \hat{\alpha}_2(\mathbf{k}), \quad (6.7)$$

gdzie:

$$\begin{aligned} u_{\mathbf{k}}^2 &= \frac{1}{2} \left\{ 1 + \sqrt{1 - \frac{4\gamma^2(\mathbf{k})}{[\varepsilon_1(\mathbf{k}) - \varepsilon_2(\mathbf{k})]^2}} \right\}, \\ v_{\mathbf{k}}^2 &= \frac{1}{2} \left\{ 1 - \sqrt{1 - \frac{4\gamma^2(\mathbf{k})}{[\varepsilon_1(\mathbf{k}) - \varepsilon_2(\mathbf{k})]^2}} \right\}, \end{aligned} \quad (6.8)$$

i

$$\begin{aligned} \varepsilon_{1,2}(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2} [(g_p - g_0) \mu_B B - C] \\ &\pm \frac{1}{2} \sqrt{[(g_p + g_0) \mu_B B - C]^2 + 8Sxx_p \tilde{A}_p^2(\mathbf{k})}, \end{aligned} \quad (6.9)$$

tutaj $C = \tilde{A}_p(0)(x_p + 2Sx)$.

Łatwo zauważyć, że ponieważ całka wymiany $A_p(\mathbf{R})$ maleje eksponencjalnie ze wzrostem odległości R [130]:

$$A_p(\mathbf{R}) = A_p \exp(-2R/l_{ex}),$$

gdzie: $l_{ex} \sim a (v_0 = a^3)$, to:

$$\tilde{A}_p(\mathbf{k}) = \frac{\tilde{A}_p(0)}{[1+k^2 l_{ex}^2/4]^2}, \quad \tilde{A}_p(0) = \frac{\pi^2 l_{ex}^3}{4 v_0} A_p. \quad (6.10)$$

Przyjmując teraz zewnętrzne pola magnetyczne równe zero, ($B = 0$), uwzględniając równanie (6.10), wyrażenie $\varepsilon_{1,2}(\mathbf{k})$ łatwo jest przekształcić do postaci:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{1,2}(\mathbf{k}) &= -\frac{1}{2} \tilde{A}_p(0)(x_p + 2Sx) \left\{ 1 \pm \sqrt{1 - \frac{8Sxx_p}{(x_p + 2Sx)^2} f\left(\frac{k^2 l_{ex}^2}{4}\right)} \right\}, \\ f\left(\frac{k^2 l_{ex}^2}{4}\right) &= 1 - \frac{1}{[1+k^2 l_{ex}^2/4]^4}. \end{aligned} \quad (6.11)$$

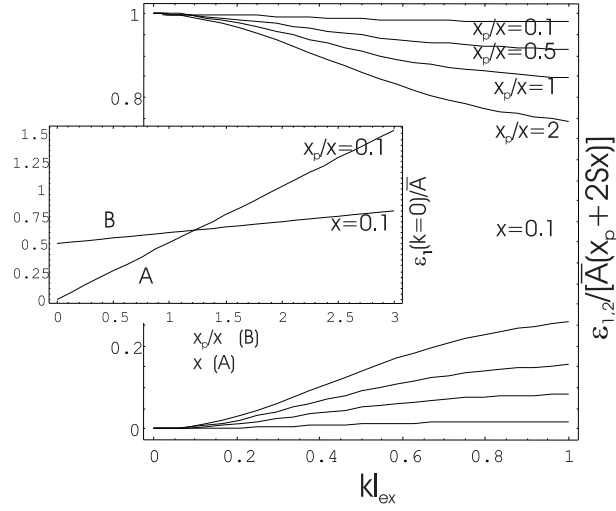
Zatem hamiltonian $\overline{\langle \hat{H}_s \rangle}_p$, zgodnie z równaniem (6.7), zapisać można w następującej postaci:

$$\begin{aligned} \overline{\langle \hat{H}_s \rangle}_p &= N \left\{ g_0 \mu_B S x B - g_p \mu_B x_p B / 2 + 2x x_p \tilde{A}_p(0) \right\} \\ &+ \frac{v_0}{(2\pi)^3} \int \sum_{j=1}^2 \varepsilon_j(\mathbf{k}) \hat{\alpha}_j^+ \hat{\alpha}_j(\mathbf{k}) d^3 k. \end{aligned} \quad (6.12)$$

Z przedstawionych powyżej formuł wynika [114, 27, 28], że w DMS w niskich temperaturach, spektrum spinowych wzbudzeń składa się z dwóch gałęzi fal spinowych. Przy braku obecności zewnętrznego pola magnetycznego ($B = 0$), dolna gałąź $\varepsilon_2(\mathbf{k})$ jest bezszczelinowa, tj. $\varepsilon_2(0) = 0$, natomiast górna gałąź jest typu 'optycznego', $\varepsilon_1(\mathbf{k})$, tj. ma szczelinę. Ta szczelina jest stosunkowo szeroka $\varepsilon_1(0) = -\tilde{A}_p(0)(x_p + 2Sx)$, rzędu eV.

Obecność fal spinowych ze szczeliną jest charakterystyczna dla ferrimagnetyków. Zatem układ DMS jest jako całość ekwiwalentny z ferrimagnetykiem z dwoma magnetycznymi podsieciami. Szczelina w dyspersji magnonów jest w takim przypadku rzędu energii wymiany obu podsieci.

Zaobserwować też można, że energia gałęzi dolnej fal spinowych $\varepsilon_2(\mathbf{k})$ rośnie z k , a energia gałęzi górnej $\varepsilon_1(\mathbf{k})$ — maleje, co przedstawiono na rys. 6.1, za [27, 28].



Rys. 6.1. Dyspersja fal spinowych w DMS dla kilku różnych koncentracji dziur pośredniczących wymianę spinową; wstawka: zależność szczeliny magnonów 'optycznych' od koncentracji dziur (B) i domieszek (przy stałym x_p/x) (A), za [27, 28].

Dla małych kwazipędów, tj. dla $kl_{ex} \ll 1$ (blisko punktu Γ), dyspersja magnonów może być przybliżona w następujący prosty sposób:

$$\begin{cases} \varepsilon_1(\mathbf{k}) = \varepsilon_0 - Dk^2, \\ \varepsilon_2(\mathbf{k}) = Dk^2, \end{cases} \quad (6.13)$$

z $\varepsilon_0 = -\tilde{A}_p(0)(x_p + 2Sx)$, $D = -\tilde{A}_p(0) \frac{2Sxx_p}{x_p + 2Sx} l_{ex}^2$ (natomiast dla granicy [sztucznej, wobec ograniczenia strefy Brillouina] dla $kl_{ex} \gg 1$, $\varepsilon_1(\infty) = -\tilde{A}_p(0) 2Sx$, $\varepsilon_2(\infty) = -\tilde{A}_p(0) x_p$).

6.2 Dekoherencja spinu ekscytonu w kropce kwantowej otoczonej materiałem DMS

Znając kolektywne magnetyczne mody pasmowe w DMS, można teraz rozwiązać zagadnienie defazowania spinowych stopni swobody ekscytonu zlokalizowanego w kropce kwantowej w otoczeniu DMS. Problem ten został rozwiązany przez zespół z Politechniki Wrocławskiej i przedstawiony w serii prac [76, 27, 29, 28]. W pewnym skrócie, zostało to przeprowadzone w opisany niżej sposób.

Hamiltonian opisujący oddziaływanie pary e-h (ekscytonu) w kropce kwantowej z otoczeniem DMS można zapisać w postaci: (spiny pasmowych dziur nie

wnoszą wkładu):

$$\begin{aligned} \hat{H}_{sd}(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h) = & -2\beta_0 \sum_{\mathbf{n}} A_e(\mathbf{R}_e - \mathbf{R}_n) \hat{\mathbf{s}}_e \cdot \hat{\mathbf{S}}_n \\ & -2\beta_0 \sum_{\mathbf{n}} A_h(\mathbf{R}_h - \mathbf{R}_n) \hat{\mathbf{s}}_h \cdot \hat{\mathbf{S}}_n, \end{aligned} \quad (6.14)$$

gdzie: $\hat{\mathbf{s}}_{e(h)}$ jest operatorem spinu elektronu (dziury) ekscytonu zlokalizowanego w kropce kwantowej, \mathbf{R}_n oznacza położenie domieszki magnetycznej (Mn^{2+}) w DMS, $\hat{\mathbf{S}}_n$ jest operatorem spinu tej domieszki; sumowanie po \mathbf{n} przebiega po wszystkich zajętych przez domieszki węzłach sieci krystalicznej DMS. Czynniki $A_{e(h)}(\mathbf{R}_{e(h)} - \mathbf{R}_n)$ opisuje oddziaływanie wymienne typu $s-d$, pomiędzy elektronem (dziurą) ekscytonu w kropce a magnetyczną domieszką (fenomenologiczny czynnik β_0 wprowadzono tu w celu uwzględnienia dodatkowego osłabienia tej całki wymiany spowodowanego przez strukturalną separację kropki kwantowej zanurzonej w kryształ DMS; będzie on dopasowywany do danych eksperymentalnych [131, 132]).

Przesunięcie energii ekscytonu (dla zgodnego (1) i przeciwnego (2) ustawienia spinów pary e-h) ma następującą postać [114, 27, 28]:

$$\begin{aligned} E_{1(2)ns_z} = & E_n + \Delta \\ & + 2s_z S x_i \beta \left[\tilde{A}_e(0) - (+) \tilde{A}_h(0) \right] m(T), \end{aligned} \quad (6.15)$$

gdzie: E_n jest energią gołego ekscytonu w kropce (w fazie paramagnetycznej DMS), $s_z = \pm \frac{1}{2}$ jest rzutem spinu elektronu w parze e-h dla przeciwnego ustawienia $[(1, s_z = \pm \frac{1}{2})]$ lub zgodnego $[(2, s_z = \pm \frac{1}{2})]$ spinów pary e-h; S oznacza spin domieszki magnetycznej w DMS, $m(T)$ jest zależną od temperatury składową magnetyzacji spinowego podukładu domieszek w DMS. Dla parametrów materiałowych jak podano w Tab. 3 [za oryginalną publikacją [114]], dla stanu podstawowego pary e-h, tj. stanu $[1, s_z = \frac{1}{2}]$, można oszacować [114] odpowiedni temperaturowy wkład do magnetyzacji domieszek: $m(T) \sim 5.6 \cdot 10^{-3} T^{3/2}$. Obliczone zgodnie z powyższymi formułami przesunięcie energetyczne tego poziomu daje możliwość porównania (przy wykorzystaniu zależności (6.15) i dla odpowiednio dobranego $\beta_0 \sim 0.1$ [131, 132]) z danymi pomiarowymi dla układu typu kropka zanurzona w DMS: $\text{Zn}_{0.75}\text{Mn}_{0.25}\text{Se}/\text{CdSe}$ [131, 132] (Tab. 4, za pracą [114]). Podkreślić tu należy dobrą zgodność ilościową wyników modelu z danymi eksperymentalnymi.

Tab.3. Parametry struktury dla $\text{Zn}_{0.75}\text{Mn}_{0.25}\text{Se}/\text{CdSe}$ [131, 132, 133]

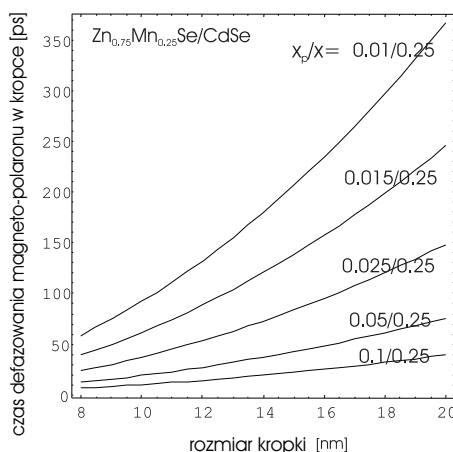
spinowe wymienne oddziaływanie dla dziur $\tilde{A}_p(0)$ ($\simeq \tilde{A}_h(0)$)	-1.3 eV
spinowe wymienne oddziaływanie dla elektronów $\tilde{A}_e(0)$	0.26 eV
koncentracja domieszek magnetycznych x	0.25
koncentracja dziur x_p	0.025
faktor strukturalnej separacji β_0	0.1
spin domieszki Mn^{2+}	5/2
stała sieciowa (ZnSe)	0.57 nm
masa efektywna elektronu[dziury] (ZnSe)	0.2[0.6] m_e
rozmiar kropki (CdSe) (model)	10 nm

Tab.4. ΔE dla EMP w kropce kwantowej w DMS: $\text{Zn}_{0.75}\text{Mn}_{0.25}\text{Se}/\text{CdSe}$, wg. [114]

T[K]	eksperyment [131] [eV]	model [eV]
2	2.085	2.085
9	2.088	2.087
20	2.090	2.091

Mając do dyspozycji znalezione analityczne wyrażenia dla wszystkich modów fal spinowych w DMS i posługując się formułą na czas defazowania $\tau \simeq d/v_g$, można bezpośrednio oszacować ten czas w przypadku spinu ekscytonu ulegającego dekoherencji na skutek dyssypacji energii wymiany spinowej w morzu magnonów w otoczeniu DMS. Ubieranie spinowej struktury zlokalizowanego ekscytonu w fale spinowe (magnony) odpowiada tworzeniu ekscytonowego magneto-polaronu (EMP) (dalsze uogólnienie fononowego polaronu). Podobnie jak w przypadku ładunków i fononów, defazowanie stanu ekscytonu w wyniku tworzenia magneto-polaronu EMP w kropce wiąże się z inercją podukładu magnetycznego w DMS. W przypadku szybko (nieadiabatyicznie) wzbudzonego w kropce ekscytonu następuje z opóźnieniem hybrydyzacja jego spinu z modami fal spinowych. Stan gołego ekscytonu nie jest stanem stacjonarnym przy uwzględnieniu oddziaływania jego spinu z magnetycznego podukładu DMS. Formowanie EMP czyli stopniowe ubieranie spinowej struktury ekscytonu w chmurę fal spinowych zlokalizowanych w kropce towarzyszy transfer nadmiarowej spinowej energii wymiennej do kryształu na zewnątrz kropki przenoszony przez opuszczający kropkę pakiet falowy magnonów. Podobnie jak dla zwykłego polaronu, energia EMP jest niższa od energii gołego ekscytonu i dlatego EMP jest stabilną kwazicząstką.

Ważne jest zauważyć, że dla stanu niestacjonarnego energia jest nieokreślona, i ma tu tylko sens jako wartość średnia, dodatkowo w średnim dzielona pomiędzy oddziałującymi podukładami, czyli ekscytonem w kropce i magnonami w DMS. Widać stąd wyraźnie, że tworzenia polaronów, czyli defazowanie ekscytonu, nie może być interpretowane w terminach przejść kwantowych ujmowanych *złotą regułą Fermiego*, ale musi być traktowane jako ewolucja niestacjonarnego stanu dwóch układów splątanych kwantowo w nieseparowalny sposób.



Rys. 6.2. Zależność czasu defazowania spinu ekscytonu w kropce kwantowej w otoczeniu półmagnetycznego półprzewodnika (DMS) od rozmiaru kropki (paraboliczna), dla różnych koncentracji domieszek i dziur, za [28].

Prędkość grupowa magnonów, $v_g = \frac{\partial\omega(k)}{\partial k}$ (dla $k \sim 1/d$, podobnie jak w przypadku fononów z powodu efektu szyjki butelki dla kropek kwantowych) prowadzi do wyrażenia:

$$\tau \simeq \frac{d}{v_g} = d \left(\frac{\partial\epsilon}{\partial p} \right)^{-1} = \frac{\hbar d}{2Dk} \simeq \frac{\hbar d^2}{2D},$$

Zatem czas ubierania w magnony (defazowania spinu w kropce) skaluje się jak d^2 i jest stosunkowo długi dla typowych nanostruktur ($d \sim 10$ nm). Czas defazowania zależy od koncentracji domieszek magnetycznych i od koncentracji dziur w DMS za pośrednictwem D w wyrażeniu na prędkość grupową magnonów (6.13). Przykłady przedstawione są na rys. 6.2 (wg. opracowania [27]). Dla kropki w DMS typu Zn(Mn)Se/CdSe o rozmiarach ~ 10 nm i dla koncentracji domieszek magnetycznych $x = 0.25$ i dziur $x_p = 0.025$ czas defazowania spinu obliczony według powyższej formuły osiąga eksperymentalnie zmierzoną wartość dla tego układu (Zn_{0.75}Mn_{0.25}Se/CdSe) [131, 132, 131], około 150 ps. Czas anihilacji ekscytonu w tym układzie jest rzędu 600 ps, co pozwala na uformowanie magneto-polaronu EMP w kropce przed jego anihilacją (czyli dekoherencją amplitudową).

Jak już wcześniej podkreślaliśmy, skala czasowa defazowania spinu w kropce kwantowej w wyniku ubierania go w chmurę fal spinowych z magnetycznego otoczenia ma istotne znaczenie dla oceny realności możliwych schematów koherentnego sterowania spinem w kropkach i wykorzystania spinu dla QIP w nanostrukturach magnetycznych. Nanostruktury z wykorzystaniem DMS wydają się atrakcyjne dla zastosowań informatycznych, z uwagi na silne przyspieszenie sterowania spinem poprzez oscylacji Rabięgo qubitu spinowego [16, 17], w wyniku gigantycznego wzrostu członu Pauliego (wzrostu efektywnego czynnika giroma-

gnetycznego). W magnetycznych układach pojawiają się jednak niedostrzegane poprzednio silne efekty dekoherencyjne związane z obecnością fal spinowych (magnonów) w uporządkowanych magnetycznie fazach. Defazowanie spinu w wyniku inercyjnego tworzenia magneto-polaronów jest niekorzystne w takim samym stopniu, jak tworzenie zwykłych polaronów w odniesieniu do orbitalnych stopni swobody w nanostrukturach. Podobnie jak w przypadku defazowania ładunków przez fonony, czas defazowania spinów w kropkach w otoczeniu DMS lokuje się pośrodku okna 6-ciu rzędów między czasami sterowania spinem (pikosekundy), a czasem amplitudowej dekoherencji spinu w kropce (mikrosekundy), co uniemożliwia wypełnienie kryteriów DiVincenzo [16, 17, 26]. Cała skala czasowa kinetyki spinowej w kropkach jest przesunięta w stosunku do kinetyki ładunków o 3 rzędy wielkości w kierunku wolniejszych procesów, ale defazowanie również, lokując się niekorzystnie w samym środku między sterowaniem a relaksacją, podobnie jak dla fononowej dekoherencji.

6.3 Mikroskopowy opis defazowania spinu w kropce kwantowej w magnetycznym otoczeniu

Ten fragment opisu teorii defazowania rozwiniętej w ośrodku wrocławskim ma szczególnie istotne znaczenie, wiąże się bowiem z odkryciem ważnego efektu dotyczącego defazowania spinu, a mianowicie efektu wymrażania tego defazowania.

Rozważamy półprzewodnik półmagnetyczny (DMS) typu III-V (np. Ga(Mn)As) lub II-VI (np. Zn(Mn)Se) i założmy, że w materiale DMS ulokowana jest kropka kwantowa (np. Ga(Mn)As/InAs lub Zn(Mn)Se/CdSe [131, 132, 131]). W kropce tej szybko (nieadiabatycznie) wzbudzamy ekscyton metodami optycznymi. Dynamikę dalszego procesu hybrydyzacji nieadiabatycznie wzbudzonego ekscytonu z otoczeniem kropki opisuje hamiltonian całego takiego układu. Ograniczając się do spinowych stopni swobody ekscytonu i odpowiednio spinowej części otoczenia, stosowny hamiltonian ma postać:

$$\hat{H} = \hat{H}_{ex} + \hat{H}_{sd} + \hat{H}_{pd}, \quad (6.16)$$

gdzie część ekscytonowa w kropce (dla modelu kwazi-2D parabolicznej kropki [1] w słabym zewnętrznym polu magnetycznym prostopadłym do płaszczyzny kropki):

$$\begin{aligned} \hat{H}_{ex} = & \hat{H}_e(\mathbf{R}_e) + \hat{H}_h(\mathbf{R}_h) - \frac{e^2}{\epsilon_0|\mathbf{R}_e - \mathbf{R}_h|} \\ & + \Delta + g_e\mu_B B \hat{s}_{ze} + g_h\mu_B B \hat{s}_{zh}, \end{aligned} \quad (6.17)$$

gdzie z kolei jednocząstkowy hamiltonian elektronu (dziury) w kropce:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{e(h)} = & -\frac{\hbar^2}{2m_{e(h)}^*} \left[\Delta_r + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] \\ & + \frac{1}{2}m_{e,h}^* (\omega_{0,e(h)}^2 + \frac{1}{4}\omega_{c,e(h)}^2) r^2 + \frac{\hbar\omega_{c,e(h)}}{2} \hat{l}_z + U_{e(h)}(z), \end{aligned} \quad (6.18)$$

tutaj $\mathbf{R} = (\mathbf{r}, z)$, $\mathbf{r} = (x, y)$; $\omega_{0,e(h)}$ — krzywizna parabolicznego potencjału kropki dla elektronu (dziury); $\omega_{c,e(h)} = \frac{|e|B}{m_{e(h)}^*c}$ — energia cyklotronowa; $U_{e(h)} = V_0\Theta(|z| - z/z_0)$ — potencjał ograniczający kropki w kierunku pionowym; Δ — wzbroniona przerwa (e-h); $\mu_B = \frac{\hbar|e|\hbar}{2m_e c}$ — magneton Bohra, $g_{e(h)}$ — czynnik giromagnetyczny dla elektronu (dziury) w kropce; $\hat{s}_{ze(h)}$ — z składowa operatora spinu elektronu (dziury); $m_{e(h)}^*$ — efektywna masa elektronu (dziury); $\mathbf{B} = (0, 0, -B)$ — zewnętrzne pole magnetyczne.

Oddziaływanie wymienne (s(p)-d) między domieszkami magnetycznymi w DMS i parą e-h w kropce może być zapisane w postaci [134, 131, 132]

$$\begin{aligned} \hat{H}_{sd}(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h) = & -2\beta_0 \sum_{\mathbf{n}} A_e(\mathbf{R}_e - \mathbf{R}_{\mathbf{n}}) \hat{\mathbf{s}}_e \cdot \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{n}} \\ & -2\beta_0 \sum_{\mathbf{n}} A_h(\mathbf{R}_e - \mathbf{R}_{\mathbf{n}}) \hat{\mathbf{s}}_h \cdot \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{n}}, \end{aligned} \quad (6.19)$$

gdzie: $\mathbf{R}_{e(h)}$ oznacza położenie elektronu (dziury) w kropce; $\hat{\mathbf{s}}_{e(h)}$ to operator spinu elektronu (dziury) w kropce; $\mathbf{R}_{\mathbf{n}}$ oznacza położenie magnetycznej domieszki w węźle \mathbf{n} sieci DMS; $\hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{n}}$ to operator spinu magnetycznej domieszki w punkcie $\mathbf{R}_{\mathbf{n}}$; sumowanie po \mathbf{n} przebiega po wszystkich węzłach zajętych przez domieszki; wprowadzono dodatkowo fenomenologiczny parametr β_0 redukujący oddziaływanie wymienne z kropką w wyniku strukturalnej separacji (parametr ten jest dopasowywany z eksperymentu i przyjmuje wartość $\beta_0 \sim 0.1$ [131, 132]). Czynniki $A_{e(h)}(\mathbf{R}_e - \mathbf{R}_{\mathbf{n}})$ opisuje s(p)-d oddziaływanie wymienne elektronu (dziury) z domieszką ($A_e(\mathbf{R}_e - \mathbf{R}_{\mathbf{n}}) > 0$ i $A_h(\mathbf{R}_e - \mathbf{R}_{\mathbf{n}}) < 0$).

Kolejny fragment hamiltonianu, \hat{H}_{pd} , jest hamiltonianem magnetycznego podukładu w DMS — magnetycznych domieszek i pasmowych dziur:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{pd} = & \hat{H}_p + g_p \mu_B B \sum_{j=1}^{N_p} \hat{\mathbf{s}}_j + g_0 \mu_B B \sum_{\mathbf{n}} \hat{\mathbf{S}}_{z\mathbf{n}} \\ & -2 \sum_{\mathbf{n}} \sum_{j=1}^{N_p} A_p(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{\mathbf{n}}) \hat{\mathbf{s}}_j \cdot \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{n}}, \end{aligned} \quad (6.20)$$

gdzie: \mathbf{R}_j , $\hat{\mathbf{s}}_j$ to położenie i spin j -tej dziury, g_0, g_p to czynniki giromagnetyczne (Landego) domieszki magnetycznej i dziury pasmowej.

Kolejny składnik, fermionowy hamiltonian dziur pasmowych, czyli H_p , modelowany może być dla płytkich i głębokich akceptorów w sposób szczegółowo przedstawiony w [27, 28]. W obu przypadkach \hat{H}_p nie zależy jawnie od konkretnego przypadkowego rozkładu akceptorów w kryształ, co ułatwia uśrednienie po stanach dziurowych i rozkładach domieszek (wg schematu przedstawionego w jednym z poprzednich podrozdziałów).

Spinowa struktura ekscytonu w kropce może być wyrażona poprzez cztery możliwe spinowe stany pary e-h (warto tu dodać, elektron i dziura nie są identycznymi cząstkami kwantowymi i przez to są rozróżnialne) $s_{ze} = \pm \frac{1}{2}$; $s_{zh} = \pm \frac{1}{2}$. Te cztery stany spinowe są zdegenerowane przy nieobecności pola magnetycznego i dla paramagnetycznej fazy DMS. Ekscytonowe funkcje własne i energie (odpowiadające hamiltonianowi H_{ex}) mają zatem postać:

- dla przeciwnych spinów w parze e-h ($j = 1$),

$$\Psi_{n,s_z}^1(\mathbf{R}_e\sigma_e, \mathbf{R}_h\sigma_h) = \psi_n^1(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h\sigma_h)\phi_{s_z}(\sigma_e)\phi_{-s_z}(\sigma_h), \quad (6.21)$$

- dla zgodnego ustawienia spinów w parze e-h ($j = 2$),

$$\Psi_{n,s_z}^2(\mathbf{R}_e\sigma_e, \mathbf{R}_h\sigma_h) = \psi_n^1(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h\sigma_h)\phi_{s_z}(\sigma_e)\phi_{s_z}(\sigma_h). \quad (6.22)$$

Odpowiadająca tym stanom energia:

$$E_{j=1(2)ns_z} = E_n + (g_e - (+) g_h)\mu_B s_z B + \Delta,$$

gdzie minus odpowiada $j = 1$, a plus $j = 2$, i

$$\int \psi_n^*(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_e)\psi_m(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_e)d^3\mathbf{R}_e d^3\mathbf{R}_h = \delta_{nm},$$

$$\sum_{\sigma} \phi_{s_z}^*(\sigma)\phi_{s_z'}(\sigma) = \delta_{s_z s_z'},$$

n oznacza tu odpowiedni komplet liczb kwantowych (bez spinu) i $s_z = \pm\frac{1}{2}$ (rzut spinu *elektronu* z pary e-h).

Przez $a_{jns_z}^{(+)}$ oznaczamy teraz bozonowe operatory anihilacji (krecji) ekscytynu w stanie jns_z ($j = 1, 2$ dla przeciwnego i zgodnego ustawienia spinów w parze e-h). Hamiltonian (6.17) można zatem przedstawić w postaci II kwantowania:

$$\hat{H}_{ex} = \sum_{jns_z} E_{jns_z} \hat{a}_{jns_z}^+ \hat{a}_{jns_z}. \quad (6.23)$$

Hamiltonian (6.19) także może być przepisany wg reguł II kwantowania w bazie stanów ekscytonowych (6.23), tj. $\sum_{\mu, \mu'} \langle \mu | \hat{H}_{sd} | \mu' \rangle \hat{a}_{\mu}^+ \hat{a}_{\mu'}$, gdzie $\mu = (jns_z)$.

6.3.1 Ubieranie ekscytynu w kropce w magnony z DMS — hamiltonian s-d

Hamiltonian oddziaływania ekscytynu w kropce z domieszkami magnetycznymi \hat{H}_{sd} może być zapisany w następującej postaci [114, 113, 29]:

$$\hat{H}_{sd} = \hat{H}_{sd}^1 + \hat{H}_{sd}^2, \quad (6.24)$$

gdzie

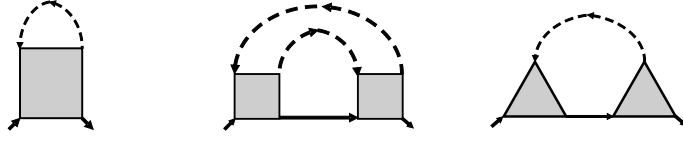
$$\begin{aligned} & \hat{H}_{sd}^1 - \left(\frac{v_0}{(2\pi)^3}\right)^2 2Sx\beta_0 \int d^3k_1 \int d^3k_2 \\ & \left[v_{\mathbf{k}_2} \hat{\alpha}_1^+(\mathbf{k}_2) + u_{\mathbf{k}_2} \hat{\alpha}_2^+(\mathbf{k}_2) \right] \\ & \left[v_{\mathbf{k}_2+\mathbf{k}_1} \hat{\alpha}_1(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_1) + u_{\mathbf{k}_2+\mathbf{k}_1} \hat{\alpha}_2(\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_1) \right] \\ & \sum_{n,n'} \sum_{s_z=-1/2}^{1/2} s_z \left\{ \left[F_{nn'}^e(\mathbf{k}_1) - F_{nn'}^h(\mathbf{k}_1) \right] \hat{a}_{1ns_z}^+ \hat{a}_{1n's_z} \right. \\ & + \left[F_{nn'}^e(\mathbf{k}_1) + F_{nn'}^h(\mathbf{k}_1) \right] \hat{a}_{2ns_z}^+ \hat{a}_{2n's_z} \\ & + \left[F_{nn'}^e(\mathbf{k}_1) \hat{a}_{1ns_z}^+ \hat{a}_{2n's_z} + hc \right] \\ & \left. + \left[F_{nn'}^h(\mathbf{k}_1) \hat{a}_{1ns_z}^+ \hat{a}_{2n'-s_z} + hc \right] \right\}, \end{aligned} \quad (6.25)$$

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_{sd}^2 = & -\sqrt{2Sx}\beta_0 \frac{v_0}{(2\pi)^3} \int d^3k \sum_{n,n'} \{ [v_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_1(\mathbf{k}) + u_{\mathbf{k}} \hat{\alpha}_2(\mathbf{k})] \\
 & \left[F_{nn'}^e(\mathbf{k}) \left(\hat{a}_{1n1/2}^+ \hat{a}_{1n'-1/2} + \hat{a}_{2n1/2}^+ \hat{a}_{2n'-1/2} \right. \right. \\
 & \left. \left. + \hat{a}_{1n1/2}^+ \hat{a}_{2n'-1/2} + \hat{a}_{2n1/2}^+ \hat{a}_{1n'-1/2} \right) \right. \\
 & \left. + F_{nn'}^h(\mathbf{k}) \left(\hat{a}_{1n-1/2}^+ \hat{a}_{1n'1/2} + \hat{a}_{2n1/2}^+ \hat{a}_{2n'-1/2} \right. \right. \\
 & \left. \left. + \hat{a}_{1n1/2}^+ \hat{a}_{2n'-1/2} + \hat{a}_{2n1/2}^+ \hat{a}_{1n'-1/2} \right) \right] + hc \}.
 \end{aligned} \tag{6.26}$$

Zauważamy tu, że pierwszy człon \hat{H}_{sd}^1 tego hamiltonianu odpowiada oddziaływaniu ekscytonu z falami spinowymi przy udziale *dwóch* magnonów (ponieważ w członie tym występują równocześnie operatory kreacji i anihilacji magnonu). Widzimy też, że w członie tym znajduje się element oddziaływania bez zmiany spinu ekscytonu pary e-h (w tym szczególnym przypadku, występujące równocześnie operatory kreacji i anihilacji magnonu kompensują wzajemnie zmiany spinu i spin nie jest przejmowany od magnonów przez ekscyton). Zauważamy natomiast, że drugi człon hamiltonianu, \hat{H}_{sd}^2 , jest typu *spin-flip* dla pary e-h opisuje pochłonięcie lub wypuszczenie przez ekscyton fali spinowej — pojedynczego magnonu, z równoczesną zmianą spinu pary e-h, kompensującą spin unoszony przez magnon.

Dla opisanego defazowania (a nie amplitudowej dekoherencji) interesuje nas wyłącznie członu hamiltonianu, który nie zmienia stanu podstawowego ekscytonu — taki człon prowadzi do czystego defazowania. Pozostałe człony, ze zmianą stanu prowadzą do relaksacji, czyli amplitudowej dekoherencji (opisują przeskoki między stanami ekscytonu). Nie zmieniający stanu spinowego ekscytonu w kropce, odpowiedni człon występuje wyłącznie w \hat{H}_{sd}^1 , jest on dwuoperatorowy w odniesieniu do magnonów i ekscytonu — odpowiadający mu wierzchołek jest zatem czworokątem (a nie trójkątem, jak to miało miejsce w przypadku oddziaływania fononów z ładunkami, dla których nie było ograniczeń związanych z zachowaniem spinu). W członie \hat{H}_{sd}^2 nie może być takiego składnika, gdyż spin uniesiony przez pojedynczy magnon (pojedynczy operator kreacji lub anihilacji) musi być skompensowany przez zmianę spinu ekscytonu, a więc zmianę jego stanu (wierzchołki odpowiadające tym składnikom hamiltonianu są trójkątami — tak jak w przypadku fononów — nie prowadzą tu jednak do czystego defazowania ekscytonu, ale do jego relaksacyjnych [amplitudowych] przejść [czyli do dekoherencji amplitudowej]).

Ta analiza hamiltonianu ma zasadnicze konsekwencje. Wyodrębnienie z hamiltonianu \hat{H}_{sd}^1 diagonalnego oddziaływania o wierzchołku czworokątnym, jak zauważono wyżej, prowadzi do zmiany struktury równania na operator masowy (w porównaniu z fononami i trójkątnymi wierzchołkami). Graf pierwszego rzędu (rys. 6.3) względem oddziaływania (z zamkniętą pętlą magnonową) nie wnosi wkładu do urojonej części operatora masowego (jest to standardowy rezultat w teorii matsubarowskich funkcji Greena). Graf ten opisuje tylko rzeczywistą liczbową wartość przesunięcia energetyczne ekscytonu wywołane przez magnetyzację



Rys. 6.3. Wkłady do operatora masowego: pierwszego rzędu (lewy), drugiego rzędu — pochodzące od \hat{H}_{sd}^2 (prawy) i od \hat{H}_{sd}^1 (środkowy).

(magnonową) [przesunięcie to zależne jest od temperatury]. Przesunięcie energetyczne stanów ekscytynu, rozszczepionych silnie i poprzysuwanych już wcześniej przez całkowitą spontaniczną magnetyzację DMS (poniżej temperatury krytycznej), wywołane przez magnony jest niewielkie i odpowiada wnoszonej do pełnej magnetyzacji niewielkiej poprawki magnonowej, którą została oszacowana w pobliżu $T = 0$ i była porównana z danymi eksperymentalnymi [75, 114]]. Rozważany graf nie prowadzi zatem do defazowania, ponieważ odpowiednia składowa operatora masowego nie ma części urojonej (co wynika z faktu, że funkcja korelacyjna opisująca defazowanie wiąże się poprzez transformatę Fouriera tylko z urojoną częścią funkcji Greena [intensywnością spektralną] i zatem tylko z urojoną częścią operatora masowego).

Interesujący nas urojony wkład do operatora masowego pochodzi od grafu drugiego rzędu względem oddziaływania (czworokątnego) (rys. 6.3) — ten graf opisuje *czyste defazowanie ekscytynu*.

Podkreślamy raz jeszcze, że drugi człon hamiltonianu, \hat{H}_{sd}^2 (z trójkątnymi wierzchołkami) nie wnosi żadnego wkładu do *czystego defazowania ekscytynu* — chociaż również wnosi urojone składowe do operatora masowego ekscytynu, ale nie do diagonalnej jego części (niediagonalne urojone składowe operatora masowego opisują defazowanie zmieszane z równoczesną amplitudową dekoherencją stanów, nie dotyczą jednak czystego defazowania, a takie jest przedmiotem przedstawianej tu analizy).

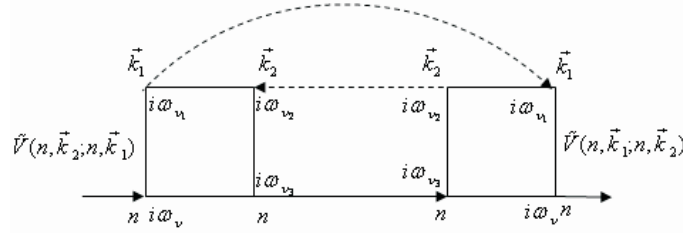
Wracając do liniowego względem czworokątnego wierzchołka człon w operatorze masowym, opisane wyżej przesunięcie energetyczne poziomów ekscytynu (w szczególności podstawowego poziomu) przybiera postać:

$$\begin{aligned} \epsilon_{1(2)ns_z} &= E_n + \Delta + (g_e - (+)g_h)\mu_B s_z B \\ &+ 2s_z S x_i \beta_0 \left[\tilde{A}_e(0) - (+)\tilde{A}_h(0) \right] m_i(B, T), \end{aligned} \quad (6.27)$$

gdzie

$$m_i(B, T) = 1 - \frac{v_0}{S(2\pi)^3} \int d^3k \left[v_{\mathbf{k}}^2 n_1(\mathbf{k}) + u_{\mathbf{k}}^2 n_2(\mathbf{k}) \right] \quad (6.28)$$

(dla $\tilde{A}_e(0) > 0$, $\tilde{A}_h(0) < 0$ i $|\tilde{A}_e(0)| < |\tilde{A}_h(0)|$ mamy następującą kolejność stanów ekscytynowych w kropce w uporządkowanej fazie DMS, $\epsilon_{1n-1/2} < \epsilon_{2n1/2} <$



Rys. 6.4. Wkład do operatora masowego ekscytynu prowadzący do czystego defazowania spinu w stanie n ekscytynu (linie ciągłe — FGM ekscytynu, linie przerywane — FGM magnonów).

$\epsilon_{2n-1/2} < \epsilon_{1n1/2}$). W pobliżu $T = 0$, dla materiału $\text{Zn}_{0.75}\text{Mn}_{0.25}\text{Se}$ wkład do magnetyzacji domieszek od magnonów: $m(0, T) \simeq 5.63710^{-3}T^{3/2}$, co daje *blue-shift* stanu podstawowego ($10-1/2$) wraz ze wzrostem temperatury, obserwowany w strukturze $\text{Zn}_{0.75}\text{Mn}_{0.25}\text{Se}/\text{CdSe}$ — Tab. 4 (dopasowanie do eksperymentalnych wyników), wg [27, 28].

6.3.2 Operator masowy w najniższym przybliżeniu dla wielokątnych wierzchołków

W pracy [114] znaleziono urojony wkład do operatora masowego dla czworokątnego wierzchołka (jedeny mogący prowadzić do czystego defazowania ekscytynu przez fale spinowe w DMS). Graf diagonalny w stanach ekscytynowych [w szczególności w podstawowym] (rys. 6.4) daje wkład do operatora masowego (zgodnie z zasadami technik grafów Feynmana opisanych szczegółowo w monografii [27, 28]):

$$\begin{aligned} & \sum_{k_1, k_2} |V(k_1, k_3 = n; n, k_2)|^2 [1 + n_1][1 + n_3] n_2 \frac{e^{-\beta\epsilon_1} e^{-\beta\epsilon_3} e^{\beta\epsilon_2} - 1}{i\omega_\nu - \epsilon_1 - \epsilon_3 + \epsilon_2} \\ & = - \sum_{k_1, k_2} |V(k_1, k_3 = n; n, k_2)|^2 \frac{[1 + n_1] n_2}{i\omega_\nu - \epsilon_1 - \epsilon_3 + \epsilon_2}, \end{aligned} \quad (6.29)$$

ostatnia równość zapisana jest przy założeniu $n_3 = 0$; dolna linia to linia ekscytynowa (skierowana zgodnie z kierunkiem grafu), daje ona wkład $[1 + n_3]$ ale z $n_3 = 0$, lub (przeciwnie skierowana do kierunku grafu) daje wkład n_3 , z $n_3 = 0$. Odpowiada to przyjętemu modelowi próżni ekscytynowej (czyli $T = 0$ dla ekscytynów, mimo że równocześnie może być $T \neq 0$ dla magnonów) [92]. Indeksy k_1, k_2 fal spinowych reprezentują pęd i numer gałęzi magnonów (tj. $k = (\mathbf{k}, i)$, $i = 1, 2$ numeruje gałąź dolną (1) lub górną (2) fal spinowych w DMS).

6.3.3 Urojona część operatora masowego

Jak już podkreślaliśmy poprzednio urojona część funkcji Greena, czyli intensywność spektralna, której odwrotna transformata Fouriera daje funkcję korelacyjną opisującą utratę ufności początkowego stanu kwantowego, wyraża się poprzez

urojoną część operatora masowego. Dla oddziaływania spinowych stopni swobody ekscytonu w kropce z falami spinowymi w DMS urojona część operatora masowego (związana jest ona z grafem przedstawionym na rys. 6.4 i prowadząca do czystego defazowania) ma następującą postać [113, 29]:

$$\begin{aligned} \gamma_n(\omega, T) &= \pi \sum_{i,j=1}^2 \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} |V(n, \mathbf{k}_1, i; n, \mathbf{k}_2, j)|^2 \\ &\times [n_i(\mathbf{k}_1) + 1] n_j(\mathbf{k}_2) \delta(\omega - E_n - \varepsilon_i(\mathbf{k}_1) + \varepsilon_j(\mathbf{k}_2)), \end{aligned} \quad (6.30)$$

dla stanu podstawowego ekscytonu $n = 0$, gdzie oddziaływanie:

$$\begin{aligned} V(n, \mathbf{k}_1, i; n, \mathbf{k}_2, j)|_{n=0} &= \beta_0 2Sx \begin{bmatrix} v_{\mathbf{k}_2} v_{\mathbf{k}_1}, & v_{\mathbf{k}_2} u_{\mathbf{k}_1} \\ u_{\mathbf{k}_2} v_{\mathbf{k}_1}, & u_{\mathbf{k}_2} u_{\mathbf{k}_1} \end{bmatrix} \\ &\left(F_{00}^e(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) - F_{00}^h(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \right), \end{aligned}$$

macierz w odniesieniu do numeracji gałęzi magnonów $(i, j) = \begin{bmatrix} 11, & 12 \\ 21, & 22 \end{bmatrix}$, $n_i(\mathbf{k})$ — rozkład Bosego-Einsteina dla i -tej gałęzi magnonów w DMS, $u_{\mathbf{k}}$, $v_{\mathbf{k}}$ — współczynniki transformacji diagonalizacyjnej magnonów w DMS.

$$F_{nn'}^{e(h)}(\mathbf{k}) = \tilde{A}_{e(h)}(\mathbf{k}) \int d^3 R_e \int d^3 R_h \Psi_n^*(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_{e(h)}} \Psi_n(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h),$$

$$\tilde{A}_{e(h)}(\mathbf{k}) = \frac{1}{v_0} \int d^3 R A_{e(h)}(\mathbf{R}) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}},$$

$\Psi_n^*(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h)$ orbitalna część funkcji falowej stanu n ekscytonu w kropce (dla stanu podstawowego $\Psi_0 = \frac{1}{\pi^{3/2} L_e L_h L_z} \exp\{-r_e^2/2L_e^2 - r_h^2/2L_h^2 - (z_e^2 + z_h^2)/2L_z^2\}$, $\mathbf{R}_{e(h)} = (\mathbf{r}_{e(h)}, z_{e(h)})$),

$$A_{e(h)}(\mathbf{R}) = A_{e(h)} e^{-2R/l_{ex}}, \quad l_{ex} \sim a, \quad (a^3 \simeq v_0),$$

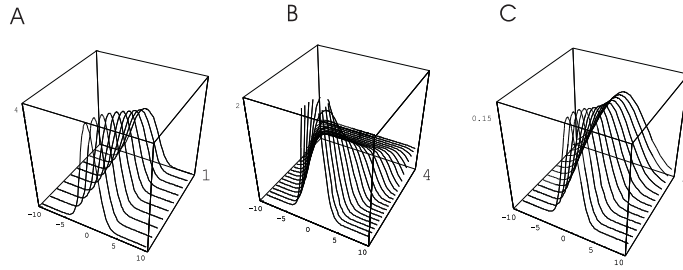
$$\tilde{A}_{e(h)}(\mathbf{k}) = \frac{\tilde{A}_{e(h)}(0)}{[1 + k^2 l_{ex}^2/4]^2}, \quad \tilde{A}_{e(h)}(0) = \frac{\pi^2 l_{ex}^3}{4 v_0} A_{e(h)}.$$

Dane materiałowe (także stałe $\tilde{A}_{e(h)}(0)$) dla kropki w materiale DMS [Zn(Mn)Se/CdSe] podane są w Tab. 3, wg. monografii [27, 28].

Po uwzględnieniu wypisanych wyżej zależności otrzymano równania [113, 29]:

$$\begin{aligned} \gamma_0(\omega, T) &= \pi \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} |V(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2, 0)|^2 \\ &\times \left\{ [n_1(\mathbf{k}_1) + 1] n_1(\mathbf{k}_2) v_{\mathbf{k}_2}^2 v_{\mathbf{k}_1}^2 \delta(\omega - E_0 - \varepsilon_1(\mathbf{k}_1) + \varepsilon_1(\mathbf{k}_2)) \right. \\ &+ [n_1(\mathbf{k}_1) + 1] n_2(\mathbf{k}_2) v_{\mathbf{k}_2}^2 u_{\mathbf{k}_1}^2 \delta(\omega - E_0 - \varepsilon_1(\mathbf{k}_1) + \varepsilon_2(\mathbf{k}_2)) \\ &+ [n_2(\mathbf{k}_1) + 1] n_1(\mathbf{k}_2) u_{\mathbf{k}_2}^2 v_{\mathbf{k}_1}^2 \delta(\omega - E_0 - \varepsilon_2(\mathbf{k}_1) + \varepsilon_1(\mathbf{k}_2)) \\ &\left. + [n_2(\mathbf{k}_1) + 1] n_2(\mathbf{k}_2) u_{\mathbf{k}_2}^2 u_{\mathbf{k}_1}^2 \delta(\omega - E_0 - \varepsilon_2(\mathbf{k}_1) + \varepsilon_2(\mathbf{k}_2)) \right\}, \end{aligned} \quad (6.31)$$

$$\varepsilon_1(\mathbf{k}) = Dk^2, \quad \varepsilon_2(\mathbf{k}) = D_0 - Dk^2, \quad V(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2, 0) = \beta_0 2Sx (F_{00}^e(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) - F_{00}^h(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)) = f(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}) = A \frac{e^{-\alpha k^2}}{[1 + \beta k^2]^2}, \quad A = \beta_0 2Sx (\tilde{A}_e(0) - \tilde{A}_h(0)), \quad \beta = l_{ex}^2/4,$$



Rys. 6.5. Ewolucja czasowa pakietu falowego magnonów opuszczającego obszar kropki kwantowej (model 1D) i unoszącego nadmiar energii wymiany do otaczającego kryształu DMS w czasie tworzenia EMP w kropce: dla pierwszego (czwartego) składnika we wzorze (6.32)—A i B (dla stosunku czasów 1 : 4); dla drugiego (trzeciego) składnika we wzorze (6.32) — C (wkład mniejszy o rząd wielkości), wg. [29].

$\alpha = l^2/2$ (l to rozmiar ekscytynu w stanie podstawowym w kropce uśredniony po kierunkach [jest to w przybliżeniu rozmiar kropki kwantowej], l_{ex} to zasięg oddziaływania wymiennego). Można powyższy wynik zapisać w ekwiwalentnej postaci,

$$\begin{aligned}
 \gamma_0(x, T) = & \pi A^2 \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} \frac{e^{-2\alpha(k_1 - k_2)^2}}{[1 + \beta(k_1 - k_2)^2]^4} \\
 & \times \left\{ [n_1(k_1) + 1]n_1(k_2)v_{k_2}^2 v_{k_1}^2 \delta(x - D(k_1^2 - k_2^2)) \right. \\
 & + [n_1(k_1) + 1]n_2(k_2)v_{k_2}^2 u_{k_1}^2 \delta(x + D_0 - D(k_1^2 + k_2^2)) \\
 & + [n_2(k_1) + 1]n_1(k_2)u_{k_2}^2 v_{k_1}^2 \delta(x - D_0 + D(k_1^2 + k_2^2)) \\
 & \left. + [n_2(k_1) + 1]n_2(k_2)u_{k_2}^2 u_{k_1}^2 \delta(x - D(k_2^2 - k_1^2)) \right\}, \quad (6.32)
 \end{aligned}$$

$x = \omega - E_0$, $n_1(k) = \frac{1}{e^{Dk^2/kT} - 1}$, $n_2(k) = \frac{1}{e^{(D_0 - Dk^2)/kT} - 1}$ i (dla małych k , $k/k_{max} \ll 1$, $k_{max} = \pi/a$) $u_k^2 = \frac{x_p}{x_p + 2Sx} - Bk^2$, $v_k^2 = \frac{2Sx}{x_p + 2Sx} + Bk^2$, $B = \frac{x_p}{x} \frac{2S - x_p/x}{(2S + x_p/x)^3} 2Sl_{ex}^2$, $D_0 = -\tilde{\mathcal{A}}_p(0)(x_p + 2Sx)$, $D = -\tilde{\mathcal{A}}_p(0) \frac{2Sx_p x}{x_p + 2Sx} l_{ex}^2$ ($\tilde{\mathcal{A}}_p(0)$ jest tu oddziaływaniem wymiennym domieszki z dziurą pasmową, przyjmujemy $\tilde{\mathcal{A}}_h(0) = \tilde{\mathcal{A}}_p(0)$, pamiętając że dla kropki oddziaływanie wymienne było renormalizowane dodatkowo przez czynnik β_0).

Rozwiązanie tych równań określa dynamikę pakietu falowego fal spinowych defazującego stan spinowy ekscytynu w kropce kwantowej. Dynamika ta, obliczona numerycznie, przedstawiona jest na rys. 6.5.

6.3.4 Różnica pomiędzy defazowaniem ekscytynu w kropce kwantowej przez magnony i fonony

Z powodu innego typu wierzchołka oddziaływania prowadzącego do czystego defazowania: ekscyton-fonony (trójkątny) i ekscyton-magnony (czworokątny) ob-

serwujemy istotną różnicę obu tych zjawisk. Wymóg zachowania spinu w wierzchołku (w czasie oddziaływania) prowadzi do konieczności równoczesnego udziału dwóch magnonów (bez zmiany stanu spinowego ekscytonu) w przeciwieństwie do fononów, gdzie bez zmiany stanu ekscytonu mogła zachodzić emisja lub absorpcja pojedynczego fononu. Dla magnonów jest inaczej – emisja magnonu musi być stowarzyszona z absorpcją innego magnonu, by skompensować utracony na wierzchołku spin w wyniku emisji fali spinowej — jak wyraża to równanie (6.30). Tu pojawia się istotna konsekwencja wyżej opisanych faktów. O ile czynniki związane z emisją (typu $[1 + n]$) pozostają niezerowe nawet w $T = 0$ (i tak jest w przypadku fononów), to czynnik absorpcyjny (typu n ; prawdopodobieństwo pochłonięcia magnonu proporcjonalne jest do ilości magnonów) maleje do zera dla $T \rightarrow 0$ i dlatego defazowanie spinu ekscytonu przez magnony staje się coraz mniejsze ($\rightarrow 0$) przy obniżaniu temperatury do $T = 0$ (w przypadku fononów defazowanie pozostawało niezerowe nawet w $T = 0$, w wyniku *tylko* emisji fononów, nawet w próżni fononowej dla $T = 0$). Mamy zatem tu do czynienia z całkowicie nowym efektem, a mianowicie z wymrażaniem defazowania spinu w pobliżu $T = 0$ (w przeciwieństwie do defazowania ładunków przez fonony). Można jeszcze zauważyć, że w przypadku magnonów $n_2 \ll n_1$ (dla $k \rightarrow 0$; z powodu szczeliny magnonowej) i dominujący wkład w niskich temperaturach wnoszą tylko człony z czynnikami $n_1(1 + n_i)$.

W wyższych temperaturach, kiedy liczba termodynamicznych magnonów (które mogą być absorbowane) dostatecznie wzrośnie, defazowanie spinu przez magnony jest jednak ponownie równie efektywne jak defazowanie ładunków przez fonony. Opisana różnica obu efektów, podkreśla większą odporność spinu na defazowanie przez magnony z DMS w niskich temperaturach w wyniku ograniczeń nałożonych przez zachowanie spinu, w porównaniu z fononowym defazowaniem ładunków (które jest silne nawet w $T = 0$). Być może efekt ten zdecyduje o przydatności spinowych stopni swobody w kropkach kwantowych w otoczeniu DMS dla nowych technik QIP, ale, jak widać, koniecznie w bardzo niskich temperaturach, w których zachodzi wymrażanie defazowania.

Rozdział 7

Oszacowanie czasu defazowania ekscytonu w kropkach II rodzaju

Zgodnie z opisem teoretycznym zamieszczonym w rozdziale 5 punktem wyjścia do wyznaczenia czasów defazowania orbitalnych stopni swobody ekscytonu w wyniku oddziaływania z kolektywnymi wzbudzeniami sieci krystalicznej w kropkach kwantowych II rodzaju jest znalezienie formfaktorów oddziaływania par elektron-dziura z fononami LO i LA, określonych formułami:

$$F_o(n_1, n_2, \mathbf{q}) = -\frac{e}{q} \sqrt{\frac{2\pi\hbar\Omega}{v\tilde{\epsilon}}} \int \Phi_{n_1}^*(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h) \times \left(e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_e} - e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_h} \right) \Phi_{n_2}(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h) d^3\mathbf{R}_e d^3\mathbf{R}_h \quad (7.1)$$

$$F_a(n_1, n_2, \mathbf{q}) = -\sqrt{\frac{\hbar q}{2MC_a}} \int \Phi_{n_1}^*(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h) \times \left(\sigma_e e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_e} - \sigma_h e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_h} \right) \Phi_{n_2}(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h) d^3\mathbf{R}_e d^3\mathbf{R}_h. \quad (7.2)$$

Intensywność spektralną można wówczas otrzymać jako urojoną część retardowanej funkcji Greena w postaci:

$$I(\omega) = -2\hbar \operatorname{Im}G_r(0, 0, \omega), \quad (7.3)$$

gdzie

$$\operatorname{Im}G_r(0, 0, \omega) = -a^{-1}\pi\delta(x) - \frac{a^{-1}\gamma'(x)/x^2}{1 + (\gamma'(x)/x)^2}, \quad (7.4)$$

$$a = 1 + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, s} \left| \frac{F_s(0, 0, \mathbf{k})}{\hbar\omega_s(\mathbf{k})} \right|^2 [1 + 2N_s(\mathbf{k})], \quad (7.5)$$

oraz $\gamma'(x) = \gamma(x)/a$ ($x = \hbar\omega - \tilde{E}'_0$, $\tilde{E}'_0 = \tilde{E}_0/a$), zaś γ oznacza urojoną część operatora masowego.

Potrzebna do ustalenia czasu defazowania funkcja korelacyjna jest natomiast odwrotną transformatą Fouriera intensywności spektralnej:

$$I(t) = -2\hbar \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \text{Im} G_r(0, 0, \omega) e^{-i\omega t}. \quad (7.6)$$

Poprzez zmianę kolejności całkowania po ω i \mathbf{k} , funkcję korelacyjną można wyrazić też w wygodnej reprezentacji (por. (5.18)):

$$I(t) = I^{(1)}(t) + I^{(2)}(t), \quad (7.7)$$

gdzie:

$$I^{(1)}(t) = a^{-1} e^{-i\frac{\tilde{E}_0}{\hbar}t}, \quad (7.8)$$

$$I^{(2)}(t) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left| \frac{F_a(0, 0, \mathbf{k})}{\hbar\omega_a(\mathbf{k})} \right|^2 \times \\ \times \left\{ [1 + N_s(\mathbf{k})] e^{-i[\tilde{E}_0/\hbar + \omega_s(\mathbf{k})]t} + N_s(\mathbf{k}) e^{-i[\tilde{E}_0/\hbar - \omega_s(\mathbf{k})]t} \right\}, \quad (7.9)$$

gdzie z kolei $\omega_s(\mathbf{k})$, jest funkcją dyspersji w paśmie fononów LO ($s=0$) i LA ($s=a$) oraz $N_s(\mathbf{k}) \equiv N_s(\omega_s(\mathbf{k}))$ jest temperaturowym rozkładem Bosego-Einsteina.

7.1 Znajdowanie formfaktorów oddziaływania ekscytonu z fononami LO i LA oraz funkcji korelacyjnej

Ponieważ w przyjętym przez nas przybliżeniu Hartree funkcja falowa ekscytonu jest iloczynem funkcji falowych elektronu i dziury

$$\Phi(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h) = \Phi_e(\mathbf{R}_e)\Phi_h(\mathbf{R}_h), \quad (7.10)$$

wyrażenie (7.1) przyjmie postać:

$$F_o(\mathbf{q}) = A_o \frac{1}{q} \int \Phi_e(\mathbf{R}_e)^2 \Phi_h(\mathbf{R}_h)^2 \left(e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_e} - e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_h} \right) d^3\mathbf{R}_e d^3\mathbf{R}_h, \quad (7.11)$$

gdzie $A_o \equiv -e\sqrt{\frac{2\pi\hbar\Omega}{v\tilde{\epsilon}}}$, $q = |\mathbf{q}|$, a dalej:

$$F_o(\mathbf{q}) = A_o \frac{1}{q} \left(\int \Phi_e(\mathbf{R}_e)^2 \Phi_h(\mathbf{R}_h)^2 e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_e} d^3\mathbf{R}_e d^3\mathbf{R}_h + \right. \\ \left. - \int \Phi_e(\mathbf{R}_e)^2 \Phi_h(\mathbf{R}_h)^2 e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_h} d^3\mathbf{R}_e d^3\mathbf{R}_h \right) \\ = A_o \frac{1}{q} \left(\int \Phi_h(\mathbf{R}_h)^2 d^3\mathbf{R}_h \times \int \Phi_e(\mathbf{R}_e)^2 e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_e} d^3\mathbf{R}_e + \right. \\ \left. - \int \Phi_e(\mathbf{R}_e)^2 d^3\mathbf{R}_e \times \int \Phi_h(\mathbf{R}_h)^2 e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_h} d^3\mathbf{R}_h \right). \quad (7.12)$$

Ponieważ funkcje falowe są unormowane, całki ich kwadratów dają 1 i zatem formfaktor oddziaływania z fononami LO możemy zapisać w postaci:

$$F_o(\mathbf{q}) = A_o \frac{1}{q} [G_e(\mathbf{q}) - G_h(\mathbf{q})], \quad (7.13)$$

gdzie

$$G_{e(h)}(\mathbf{q}) = \int \Phi_{e(h)}(\mathbf{R})^2 e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} d^3\mathbf{R}. \quad (7.14)$$

Analogicznie formfaktor oddziaływania z fononami LA możemy zapisać w postaci,

$$F_a(\mathbf{q}) = A_a \sqrt{q} [G_e(\mathbf{q}) - G_h(\mathbf{q})], \quad (7.15)$$

gdzie $A_a \equiv -\sqrt{\frac{\hbar}{2MG_a}}$.

Wyrażając całkę (7.14) we współrzędnych cylindrycznych możemy zapisać:

$$\begin{aligned} G_{e(h)}(\mathbf{q}) &= \int \Phi_{e(h)}(\mathbf{R})^2 e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}} d^3\mathbf{R} \\ &= \int \tilde{\Phi}_{e(h)}(\rho, \varphi, z)^2 e^{i(q_\perp \rho \cos \varphi + q_z z)} \rho d\rho d\varphi dz. \end{aligned} \quad (7.16)$$

Przyjmując natomiast¹

$$\begin{aligned} \tilde{\Phi}_{e(h)}(\rho, \varphi, z) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \phi_{e(h)}(\rho) e^{i\varphi} \xi_{e(h)}(z) \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\pi^{1/4} \sqrt{L_z}} \phi_{e(h)}(\rho) e^{-\frac{z^2}{2L_z^2}}, \end{aligned} \quad (7.17)$$

gdzie $\phi_{e(h)}(\rho)$ są funkcjami falowymi elektronu/dziury dla kropki 2D z rozdziału 3 (na rys. 7.1 przedstawione są numerycznie znalezione funkcje falowe dla przykładowego gaussowskiego potencjału), otrzymujemy:

$$G_{e(h)}(\mathbf{q}) = \int \phi_{e(h)}(\rho)^2 \left(\int \frac{1}{\sqrt{\pi} L_z} e^{-\frac{z^2}{L_z^2}} e^{i q_z z} dz \right) \left(\frac{1}{2\pi} \int e^{i q_\perp \rho \cos \varphi} d\varphi \right) \rho d\rho. \quad (7.18)$$

W powyższym wyrażeniu całkowanie po z daje $e^{-\frac{L_z^2}{4} q_z^2}$ natomiast całka po φ jest funkcją Bessela zerowego rzędu:

$$J_0(x) = \frac{1}{2\pi} \int e^{i x \cos \varphi} d\varphi.$$

Możemy zatem zapisać:

$$G_{e(h)}(q_\perp, q_z) = 2\pi \left(\int \phi_{e(h)}(\rho)^2 J_0(q_\perp \rho) \rho d\rho \right) e^{-\frac{L_z^2}{4} q_z^2}. \quad (7.19)$$

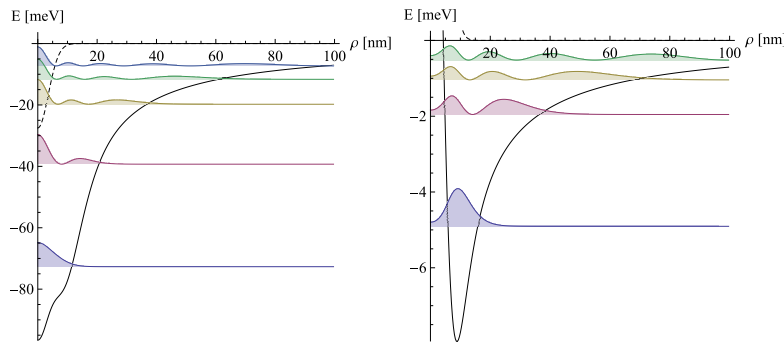
¹Przyjmujemy przybliżenie poprzecznej lokalizacji ekscytynu rozkładem gaussowskim o szerokości znacznie mniejszej od rozmiaru bocznej kropki ($L_z \sim 1nm$).

Poszczególne formfaktory oddziaływania wyrażają się natomiast przez powyższe całki następująco:

$$F_o(q_{\perp}, q_z) = -\frac{1}{\sqrt{q_{\perp}^2 + q_z^2}} e\sqrt{\frac{2\pi\hbar\Omega}{v\tilde{\epsilon}}} [G_e(q_{\perp}, q_z) - G_h(q_{\perp}, q_z)] \quad (7.20)$$

$$F_a(q_{\perp}, q_z) = -\sqrt{q_{\perp}^2 + q_z^2} \sqrt{\frac{\hbar}{2MC_a}} [G_e(q_{\perp}, q_z) - G_h(q_{\perp}, q_z)] \quad (7.21)$$

Całki (7.19) są prostymi całkami jednej zmiennej – do ich obliczania korzystamy z prostego schematu Newtona-Cotesa opartego o regułę Simpsona. Podobnie znajdujemy przebiegi funkcji korelacyjnej z równania (7.7), przeprowadzając dwuwymiarowe całkowanie we współrzędnych cylindrycznych po objętości strefy Brillouina (kod programu dla środowiska Wolfram Mathematica w załączniku B).

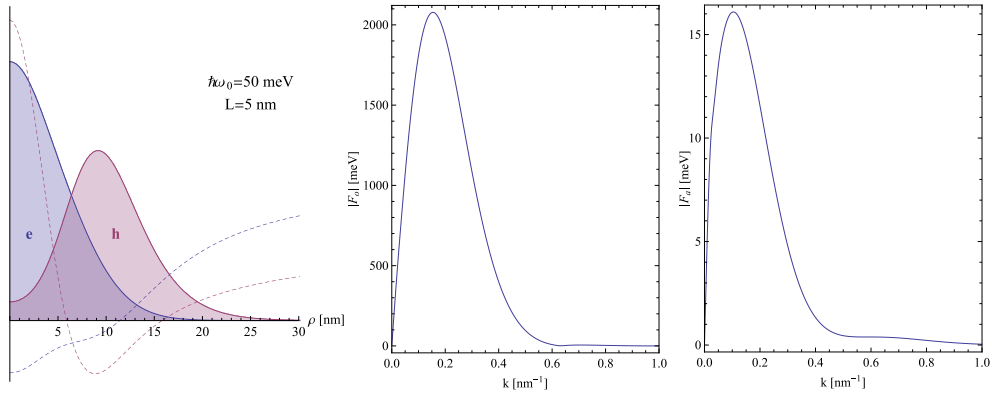


Rys. 7.1. Znalezione numerycznie przykładowe radialne profile funkcji falowej elektronu (z lewej) oraz dziury (z prawej) z symetrią cylindryczną (z momentem pędu $l = 0$) w kropce II rodzaju o potencjale wiążącym modelowanym gaussianem (krzywizna $\hbar\omega_0 = 50\text{meV}$, promień $L = 5\text{nm}$); czarną linią ciągłą zaznaczono przebiegi samouzgodnionych potencjałów Hartree, linią przerywaną – przebiegi gaussowskiego potencjału gołej kropki.

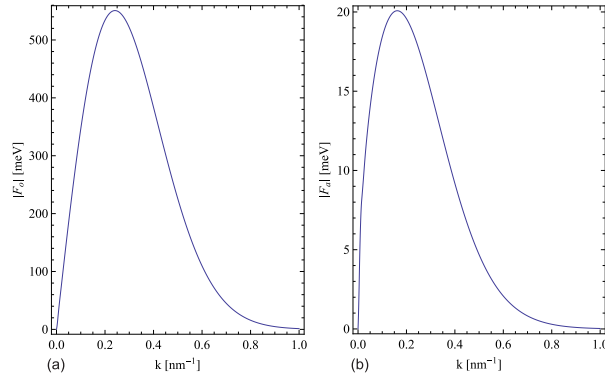
7.2 Rezultaty dla kropek II rodzaju

Dla przypadku kropek kwantowych II rodzaju postać formfaktora dla oddziaływania z fononami, zarówno LO jak i LA, jest bliska ich formie w przypadku kropek I rodzaju – por. rys. 7.2 i 7.3.

Kształt formfaktora nie zależy zatem od rodzaju kropki kwantowej, co jest zrozumiałe wobec ich definicji – decydującą rolę odgrywa tu lokalizacja przestrzenna ekscytonu, która jest podobna w obu rodzajach kropek kwantowych (także i w innych sytuacjach lokalizacji ekscytonu, np. magnetoekscytonu na zjonizowanej domieszce). Formfaktory określają obszar strefy Brillouina aktywnej

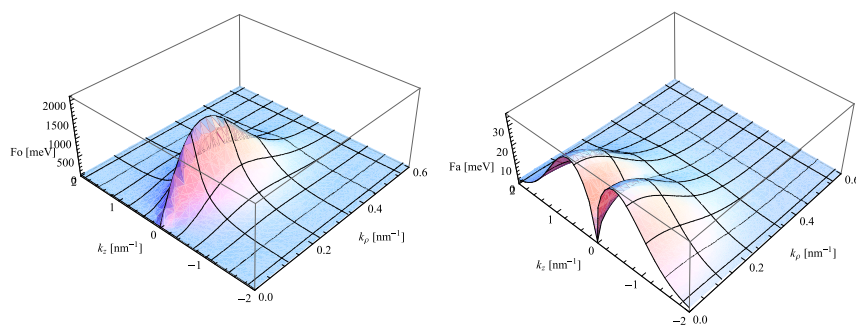


Rys. 7.2. Wyznaczone numerycznie profile funkcji falowej elektronu i dziury w kropce II rodzaju (a) i odpowiadające im formfaktory dla oddziaływania z fononami optycznymi LO (b) i akustycznymi LA (c).



Rys. 7.3. Przykładowe formfaktory oddziaływania ekscytonu z fononami optycznymi LO (a) i akustycznymi LA (b) dla kropek kwantowych I rodzaju zgodnie z formułami analitycznymi z rozdziału 5 (rozmiar kropki $d = 5 \text{ nm}$).

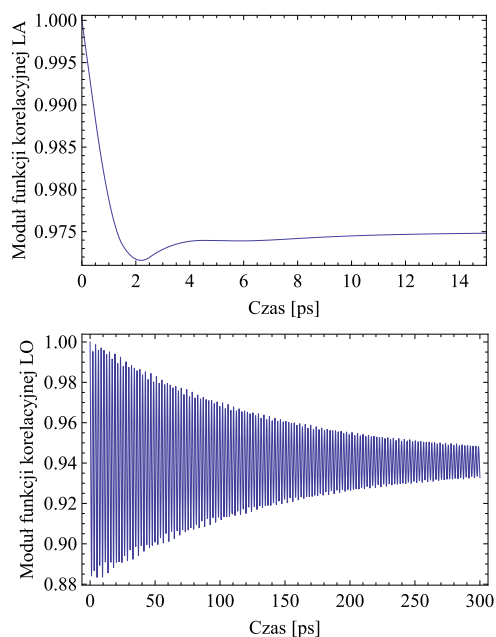
w oddziaływaniu zlokalizowanego ekscytonu z płaskimi falami pasmowych fononów (uogólnienie pojęcia *bottle-neck*) i są bardzo zbliżone dla dowolnego rodzaju lokalizacji ekscytonu – osiągają maksimum w zakresie $p \sim 1/d$, gdzie d określa przestrzenny rozmiar lokalizacji. Z rozważań przedstawionych w poprzednich dwóch rozdziałach odnośnie oszacowania czasu defazowania kwantowych stopni swobody cząstek zlokalizowanych w kropkach kwantowych wynika zatem, że w odniesieniu do kropek kwantowych II rodzaju obowiązywać będą te same zależności określające kinetykę hybrydyzacji lokalnych stanów z kolektywnymi pasmowymi wzbudzeniami (defazowanie) jak w przypadku kropek I rodzaju. Wobec podobieństwa formfaktorów dla LO i LA w kropkach obu rodzajów można wnioskować zatem, że czasy defazowania ładunkowych stopni swobody w kropkach II rodzaju w wyniku oddziaływania z fononami będą rzędu, $\tau_{LO(LA)} \sim d/v_{LO(LA)}$, gdzie $v_{LO(LA)}$ jest prędkością grupową fononów, niezależną od rodzaju kropki.



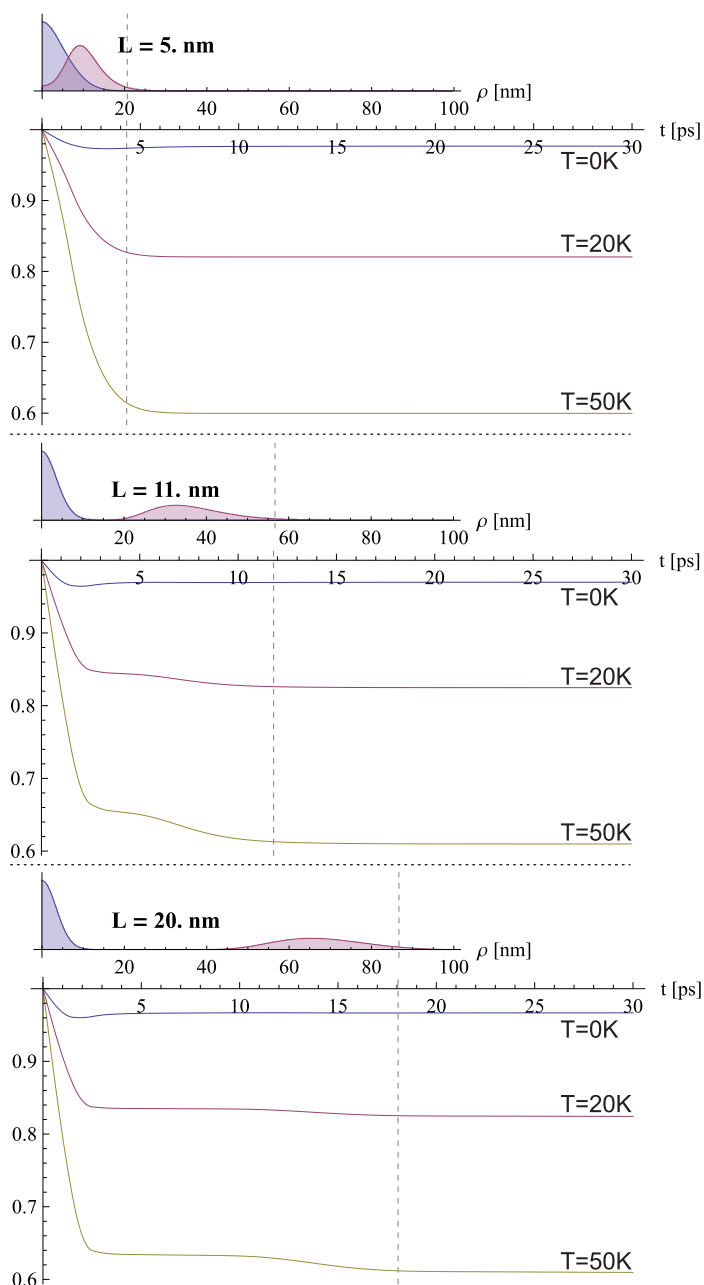
Rys. 7.4. Trójwymiarowe kształty formfaktorów oddziaływania z fononami optycznymi LO (z lewej) i akustycznymi LA (z prawej), dla kropki II rodzaju z rys. 7.2 (rozmiar poprzeczny ekscytonu $L_z = 2nm$).

Kropki kwantowe II rodzaju oferować mogą pewną względną swobodę w manipulowaniu ich rozmiarami d w porównaniu z kropkami I rodzaju, w szczególności dla kropek II rodzaju definiowanych przez elektrostatyczne ogniskowanie. Zmiany te jednak nie będą przekraczać jednego rzędu i dlatego nie mają istotnego znaczenia z punktu widzenia oczekiwań QIP (czyli kryteriów DiVincenzo).

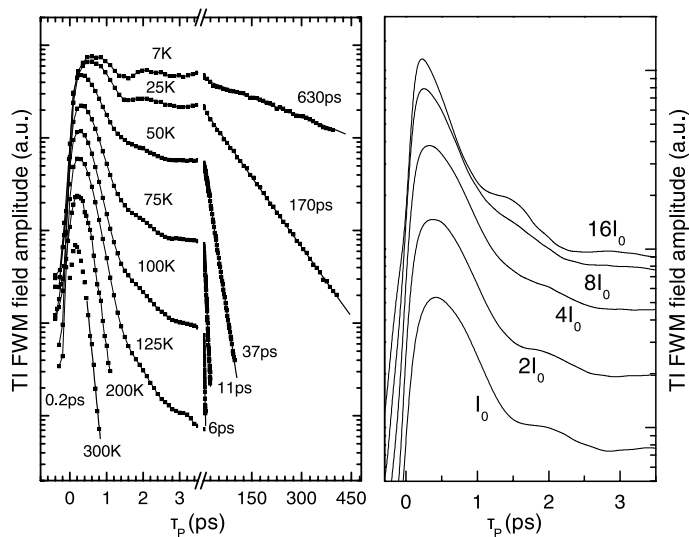
Na rys. 7.5 przedstawiono znalezione numerycznie przebiegi modułów funkcji korelacyjnej dla oddziaływania ekscytonu z fononami akustycznymi LA i optycznymi LO, natomiast na rys. 7.6 – przebiegi modułu funkcji korelacyjnej dla oddziaływania z LA dla różnych temperatur i rozmiarów kropki, uwidaczniając liniową zależność czasu defazowania dla fononów LA od rozmiarów przestrzennych ekscytonu. Przebiegi te odpowiadają zależnościom wyznaczonym dla kropek I rodzaju (zob. rozdział 5, rys. 5.5) oraz wynikom uzyskanym eksperymentalnie [89] (rys. 7.7).



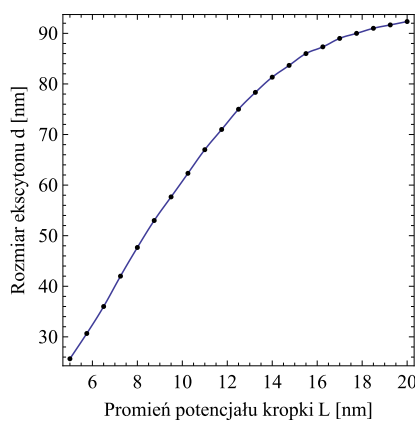
Rys. 7.5. Typowe przebiegi modułów funkcji korelacyjnej dla oddziaływania zlokalizowanego w kropce ekscytonu z fononami LA (górny) i LO (dolny) dla kropek II rodzaju (odpowiadające parametrom kropki i kształtom formfaktorów z rys. 7.2-7.4). Szybkie oscylacje w przypadku fononów LO związane są ze szczeliną w widmie dyspersji fononów LO $\hbar\Omega \sim 36.4\text{meV}$ i są rzędu $1/\Omega \sim 100\text{fs}$. Przebiegi krzywych odpowiadają kształtom uzyskiwanym dla kropek I rodzaju (por. rozdział 5).



Rys. 7.6. Moduły funkcji korelacyjnej dla oddziaływania z fononami LA w kropce kwantowej II rodzaju dla różnych temperatur i rozmiarów kropki. Zestawienie z profilami gęstości prawdopodobieństwa elektronu i dziury uwidacznia liniową zależność czasu defazowania od rozmiaru przestrzennego ekscytonu (L jest promieniem gaussiana modelującego jamy potencjału nieobsadzonej kropki, w przypadku kropek II rodzaju znacznie mniejszym od przestrzennego rozmiaru ekscytonu; zależność rozmiaru ekscytonu od rozmiaru kropki przedstawiona została na rys. 7.8). Rezultaty dla krzywizny gaussiana $\hbar\omega_0 = 50\text{meV}$.



Rys. 7.7. Zmierzone eksperymentalnie [89] metodą spektroskopii FWM (*four-wave mixing*) przebiegi funkcji korelacyjnej ekscytonu w kropce kwantowej obrazujące defazowanie przez fonony LA w zależności od temperatury (z lewej) oraz intensywności wzbudzeń (z prawej).



Rys. 7.8. Zależność rozmiaru ekscytonu (zasięg funkcji gęstości prawdopodobieństwa dla dziury) od rozmiaru kropki (promień L gaussiana modelującego potencjał wiążący kropki) dla kropek II rodzaju ($\hbar\omega_0 = 50$).

Analogicznie do ładunkowych stopni swobody, w przypadku spinowych stopni swobody wzbudzeń w kropkach II rodzaju, ich defazowanie przez fale spinowe w otoczeniu magnetycznym (DMS) nie będzie się różnić od defazowania spinu w kropkach I rodzaju, zgodnie z ogólnym schematem przedstawionym w poprzednim rozdziale. Lokalizowanie ekscytonu w kropce II rodzaju za pośrednictwem przyciągania kulombowskiego elektronu i dziury, czy też lokalizacja obu nośników gołym potencjałem wiążącym kropki I rodzaju, nie mają żadnego znaczenia odnośnie spinowej struktury pary $e - h$. W związku z tym kształt funkcji falowych, ich orbitalnej części, będzie w nieznacznym stopniu wpływał na postać form-faktorów spinowego oddziaływania wymiennego, jak zostało to przedstawione w poprzednim rozdziale i zatem oszacowanie czasu defazowania spinu ekscytonu w kropce II rodzaju będzie takie samo jak w przypadku kropki I rodzaju.

Dla typowych struktur o rozmiarach kilkudziesięciu nm czas defazowania spinu ekscytonu w kropce II (i też I rodzaju) w otoczeniu DMS będzie rzędu 10^3 ps (prędkość grupowa fal spinowych w DMS jest przyczyną tej skali czasowej). W przypadku orbitalnych stopni swobody, dla fononów LA, prędkość grupowa (prędkość dźwięku) jest rzędu 10^5 m/s, co dla kilkudziesięciu nm rozmiarów kropki, prowadzi do defazowania w skali pojedynczych ps (do kilkunastu ps). Dla fononów LO defazowanie ekscytonu przez te fonony lokuje się na skali czasowej 10^2 ps, z powodu stosunkowo mniejszej prędkości grupowej tych fononów w pobliżu punktu Γ strefy Brillouina. Niekorzystne (z punktu widzenia warunków DiVincenzo) relacje czasowe defazowania ekscytonów w kropkach kwantowych obu rodzajów wskazują na trudności z praktyczną implementacją QIP w technologii kropek kwantowych i podkreślają znaczenie poszukiwania innych koncepcji QIP (o mniejszych wymaganiach odnośnie dopuszczalnego stopnia dekoherencji), jak w przypadku nowo proponowanych rozwiązań poszukiwania stanu podstawowego zamiast realizacji unitarnej ewolucji [22].

Wartą podkreślenia i interesującą cechą defazowania kropek II rodzaju w wyraźnym odróżnieniu od kropek I rodzaju jest specyfika defazowania wynikająca z innej w przypadku kropek II budowy ekscytonu. W przypadku elektronu związanego w centrum kropki i dziury zlokalizowanej toroidalnie wokół elektronu, rozmiar przestrzenny stanu dziury znacznie wykracza poza rozmiar elektronu (zob. podrozdział 3.3 oraz rys. 7.8). W efekcie, pakiet falowy fononów ubierających ekscyton do ekscytonowego polaronu ubiera najpierw elektron a dopiero następnie dziurę – widać to po charakterystycznym zachowaniu funkcji korelacyjnej (podwójne załamanie, rys. 7.6). Defazowanie zajmuje zatem czas ubrania dziury, ponieważ dopiero wtedy cały ekscyton jest ubrany w chmurę fononów i proces defazowania jest zakończony. Ta specyficzna własność defazowania kropek II rodzaju nie prowadzi jednak do zasadniczych zmian czasu defazowania (rozmiar dziury jest zasadniczo tego samego rzędu co rozmiar elektronu), nie mniej jednak charakterystyczny kształt z podwójnym załamaniem funkcji korelacyjnej

od czasu może być przydatny do eksperymentalnego rozróżniania struktur typu I (z jednym załamaniem modułu funkcji korelacyjnej) i II (z dwoma).

Podsumowanie i wnioski

Kropki kwantowe i ich układy (kilka kropek lub całe matryce) oferują wiele nowych możliwości związanych z dużą elastycznością ich parametrów i bogatą różnorodnością stanów kwantowych nośników i wzbudzeń w nich lokalizowanych. Szczególna elastyczność cechuje kropki II rodzaju definiowane przy pomocy ogniskowania elektrostatycznego w cienkich studniach kwantowych. Poprzez zmiany kształtu elektrod oraz przykładanego napięcia osiągnąć można rozmaite formy wiążących potencjałów, które można także modyfikować w czasie rzeczywistym (tzn. w czasie działania urządzenia). Kropki te wiążą nośniki jednego znaku, ale odpychają nośniki o przeciwnym znaku. Prowadzi to delikatnej, ale bardzo złożonej struktury ekscytonów lokalizowanych przy pomocy przyciągania kulombowskiego elektronu i dziury przy równoczesnym odpychaniu jednego z nośników przez potencjał kropki. Struktura tych ekscytonów została opisana w pracy w ramach modelu Hartree rozwiązywanego w przybliżony sposób analitycznie i także numerycznie. Zaproponowano schematy wykorzystania kropek II rodzaju do konstrukcji lasera podczerwonego pompowanego nieadiabaticznym przełączeniem bocznego pola elektrycznego, oraz koherentnego źródła spolaryzowanych spinowo elektronów.

Rozpatrzono także możliwość wykorzystania kropek II rodzaju do kwantowego przetwarzania informacji. Zarówno orbitalne (ładunkowe), jak i spinowe (magnetyczne) stopnie swobody nośników uwięzionych w kropkach kwantowych mogą być rozważane jako potencjalne realizacje bitów kwantowych (qubitów). Wiodącą rolę w inżynierii stanów kwantowych w kropkach kwantowych odgrywa koherentna ewolucja stanów i możliwość ich sterowania, co wiąże się z deterministycznym charakterem unitarnej niezaburzonej ewolucji kwantowej. Podobnie jednak jak dla wszystkich kwantowych układów nie jest możliwe idealne odseparowanie od otoczenia. Niekontrolowany wpływ otoczenia powoduje dekoherencję qubitów i ich układów zakłócając teoretycznie idealne schematy kwantowego przetwarzania informacji. Poszukiwane są układy o możliwie wolnej dekoherencji, 6 rzędów wolniejszej od charakterystycznego czasu sterowania, by móc zorganizować kwantową korektę błędów i umożliwić konstrukcję skalowalnego komputera

kwantowego. Warunek ten jest głównym elementem tzw. kryteriów DiVincenzo. Nie znaleziono do tej pory układu spełniającego kryteria DiVincenzo (najbliższe są qubity i ich układy w technologii nadprzewodzących systemów, z powodu dużej delokalizacji par Coopera w stosunku do odległości międzyatomowych w fazie skondensowanej — na tej ostatniej skali odbywa się dekoherencja; poszukiwane są też rozwiązania topologiczne, z uwagi na globalność jeszcze bardziej odporne na lokalną dekoherencję; odpowiednie układy hallowskie są tu jednak trudne eksperymentalnie). Intensywnie badana są też kropki kwantowe, których technologia otrzymywania jest dobrze opanowana i zbliżona do silnie rozwiniętego przemysłu półprzewodnikowych obwodów scalonych. Badania dekoherencji w kropkach kwantowych zarówno I jak i II rodzaju staje się więc pierwszoplanowym zadaniem w tym kontekście.

Orbitalne stopnie swobody w kropkach kwantowych mogą być sterowane metodami optyki kwantowej (oscylacje Rabiego wywoływane wiązką laserową), spinowe stopnie swobody sterowane mogą być polem magnetycznym. Rozmiary kropek decydują o skali kwantowania, która w ich przypadku lokuje się w obszarze meV, czyli 1000 razy mniejszej niż w przypadku zwykłych atomów. Procesy dekoherencji badane w tej pracy dla kropek II rodzaju i wcześniej dla kropek I rodzaju pokazują jasno, że w wyniku bliskości skali energetycznej w kropkach z energiami zwłaszcza pasmowych fononów dochodzi do silnych rezonansowych efektów polaronowych, nieznanych w atomach lub innych układach. Związane z tym poszerzenia poziomów i inercja procesów hybrydyzacyjnych powodują, że używane często określenie kropek kwantowych jako sztucznych atomów jest mylące. Fakt ten wskazuje na bardzo istotną rolę procesów dekoherencji w kropkach kwantowych przy rozpatrywaniu jakichkolwiek ich zastosowań, gdyż idealne modele bez uwzględnienia defazowania i relaksacji daleko odbiegają od rzeczywistości, zwłaszcza w sytuacjach wykorzystywania inżynierii stanów kwantowych zlokalizowanych w kropkach.

Kropki kwantowe wbudowane są z reguły w sieć krystaliczną półprzewodnika podłoża lub otoczenia. Dynamiczna reakcja sieci na wzbudzenie stanów kwantowych w kropkach (związana z ubieraniem zlokalizowanych w kropce kwantowej wzbudzeń, np. ekscytynu, w kolektywne mody fononowe otaczającego materiału) powoduje silne defazowanie tych stanów (dekoherencję fazową). Inercja sieci jest tu bardzo niekorzystna i lokuje się na skalach ps. Z tego powodu sterowanie qubitem w reżimie adiabatycznym odbywać się może na stosunkowo długich skalach czasowych, zbyt długich wobec wymagań kryteriów DiVincenzo.

W pracy przedstawiono szczegółowo analizę dotyczącą fononowej dekoherencji w kropkach kwantowych pierwszego rodzaju wg wcześniejszej monografii [27], także przy pewnym udziale autora [29, 28]. Najważniejszym elementem tego fragmentu pracy jest opisanie prostej i uniwersalnej metody oceny czasu defazowania w nanostrukturach i udowodnienie odpowiedniej formuły na gruncie mikrosko-

powym w ramach formalizmu funkcji Greena (poprzez oryginalne uwzględnienie roli pozabiegunowych charakterystyk funkcji Greena).

Wskazano także na ograniczenia konwersji qubitów między ładunkami a spinami, z powodu naruszenia schematu blokady Pauliego w wyniku inercji tworzenia polaronów, co wyklucza możliwość realizacji komputerów kwantowych z konwersją qubitów *spin-charge* (szybkie przetwarzanie ładunkowe, a przechowywanie informacji na odporniejszych na dekoherencję spinach). Innym ważnym wynikiem zespołu, który przedstawiono także w pracy jest efekt silnego wzmocnienia oddziaływania ładunkowych stopni swobody w nanostrukturach z sieciowymi fononami optycznymi (silne wzmocnienie efektywnej stałej Fröhlicha w kropkach kwantowych).

Zasadniczy wynik dotyczący defazowania w nanostrukturach zrelacjonowany w pracy a oryginalnie uzyskany w zespole, sprowadza się do oceny czasu defazowania jako rozmiaru kropki podzielonego przez prędkość grupową modów kolektywnych otoczenia powodujących dekoherencję. Dla różnych wzbudzeń sieciowych, różne prędkości grupowe prowadzą do odmiennego skalowania czasu defazowania z rozmiarem kropki. Dla fononów akustycznych skalowanie to jest liniowe, ale dla fononów optycznych jest kwadratowe, podobnie jak też dla magnonów defazujących spin.

W odniesieniu do spinu ekscytonu w kropce kwantowej i jego defazowania zwłaszcza w otoczeniu półprzewodnika półmagnetycznego, w pracy zrelacjonowano szczegółową teorię tego procesu [27, 29, 28]. Wybranie magnetycznego otoczenia podyktowane było oczekiwaniem, że pole Weissa w fazie uporządkowanej magnetycznie zwiększyć może efektywny czynnik giromagnetyczny, zwykle mały w półprzewodnikach i prowadzący przez to do bardzo wolnych oscylacji Rabięgo w polu magnetycznym, czyli niekorzystnie wolnej skali sterowania spinowym qubitami w kropce. Jak jednak zauważono w poprzednich publikacjach zespołu, w magnetycznym otoczeniu występują fale spinowe — magnony i one podobnie do fononów powodować będą defazowanie spinu. Ten efekt został zilustrowany w pracy, z podkreśleniem szczegółowego mikroskopowego ujęcia problemu. Najważniejszym tu rezultatem jest odkrycie [27] nowego efektu — wymrażania defazowania spinu w kropkach. Ze względu na zachowanie spinu defazowanie wymaga udziału dwóch magnonów a to prowadzi do innej temperaturowej zależności niż w przypadku fononów: dla tych ostatnich defazowanie jest silne nawet dla $T = 0$, natomiast dla magnonów defazowanie znika do zera w $T = 0$. Fakt ten może mieć ważne konsekwencje praktyczne w obszarze spintroniki i spinowej QIP.

Wszystkie te wyniki były weryfikowane też pod kątem ich roli w kropkach II rodzaju. Pozwalają one stwierdzić, że w technologii nanostruktur półprzewodnikowych (dowolnego typu, zatem też kropek I i II rodzaju) nie można spełnić tzw. warunków DiVincenzo, koniecznych dla implementacji kwantowej korekty błędów, co z kolei jest niezbędne dla konstrukcji dużego (skalowanego do wielu qubitów)

komputera kwantowego. Wykazano, że nieusuwalna dekoherencja fazowa (tj. niekontrolowana utrata informacji kwantowej) w przypadku stanów ładunkowych w kropkach kwantowych lokuje się niekorzystnie pośrodku wymaganego okna sześciu rzędów wielkości między charakterystycznym czasem sterowania, a czasem dekoherencji amplitudowej. Bardziej obiecujące są implementacje na spinowych stopniach swobody, ale i tu występują poważne ograniczenia dekoherencyjne, szczególnie w magnetycznie uporządkowanych ośrodkach (magnony odgrywają podobną rolę do fononów) — co także zostało wykazane. W przypadku spinów potwierdzona jednak została ich przewaga nad ładunkami — zanikanie czystego defazowania spinu w niskich temperaturach (w wyniku ograniczeń nakładanych przez zasadę zachowania spinu), co może stwarzać przesłanki dla wykorzystania nisko-temperaturowej spintroniki dla praktycznego przetwarzania informacji kwantowej.

Wyniki dotyczące analiz możliwości i ograniczeń kwantowego koherentnego sterowania nanoukładami mają też ogólniejsze znaczenie w zakresie inżynierii kwantowej. Wszystkie urządzenia nanotechnologiczne i spintroniczne oparte o własności pojedynczych elektronów, ich spinów i pojedynczych fotonów będą funkcjonalne tylko w obszarze sterowalności ich kwantowych stanów. Ograniczenia związane z utratą koherencji dotyczą więc także tego typu zastosowań. Należy jednak podkreślić, że niemożność implementacji skalowalnego komputera kwantowego nie wyklucza działania prostszych koherentnie sterowanych kwantowych urządzeń nanotechnologicznych, które mogą mieć zastosowanie w optoelektronice i spintronice nowej generacji (m.in. zastosowania kryptograficzne, np. proponowane w pracy koherentne źródło spolaryzowanych spinowo elektronów).

Rozwinięty nurt badań wpływu otoczenia na stany kwantowe kropek nabiera zatem coraz większego znaczenia — zmiany wywołane przez fonony lub inne kolektywne wzbudzenia kryształu nie są tu małe i modyfikują stany kwantowe w granicach nawet 10%, co czyni fizykę sztucznych atomów (jak często nazywane są kropki kwantowe) istotnie różną od fizyki atomów, gdzie ze względu na odmienne relacje energetyczne wpływ otoczenia był nieznaczny.

Rezultaty odnośnie defazowania odzwierciedlają zasadniczy fakt, że to samo oddziaływanie, które umożliwia sterowanie, odpowiada równocześnie za dekoherencję (i w najlepszym wypadku można osiągnąć połowę wymagań DiVincenzo). Wobec zademonstrowanych nieusuwalnych ograniczeń dekoherencyjnych, konstrukcja dużego komputera kwantowego w technologii ciałostalowej (a zwłaszcza w oparciu o orbitalne stopnie swobody), wydaje się zatem mało realistyczną.

Powyżej przedstawione oceny defazowania ładunków i spinów w kropkach kwantowych były szeroko dyskutowane [27, 29, 28] w odniesieniu głównie do kropek kwantowych I rodzaju. W przedstawionej pracy zwrócono natomiast uwagę na zweryfikowanie tych ocen i wyników dla przypadku kropek II rodzaju. W pierwszej części pracy rozważono i opisano wzbudzenia ekscytonowe w kropkach

II rodzaju, w ramach przybliżenia Hartree (w wersji analitycznej i numerycznej). W odróżnieniu od prostej struktury ekscytonów w kropkach I rodzaju, w kropkach II rodzaju mamy do czynienia z bardzo delikatną i złożoną naturą ekscytonów i trionów (silnie zależną od rozmiaru kropki, pola magnetycznego i bocznego pola elektrycznego), co wynika ze sposobu wiązania ekscytonu tylko w wyniku przyciągania elektronu i dziury, ale równoczesnego odpychania jednego z nośników przez potencjał kropki (przyciągający i odpychający dla elektronu i dziury, lub odwrotnie). Przedstawiono w pracy szereg nowych rezultatów w odniesieniu do ekscytonów w kropkach II rodzaju;

- zbadano stany metastabilne ekscytonu w kropce kwantowej II rodzaju w zależności od rozmiarów i zewnętrznego pola magnetycznego, metodą Hartree analityczną,
- zweryfikowano dokładność przybliżeń analitycznych metodami numerycznymi i wskazano na obszar możliwych przeszacowań analitycznych, co zmienia ilościowe charakterystyki kropek i stanów ekscytonowych, przesuwając względne obszary różnego typu zachowania ekscytonów,
- zbadano silnie wzbudzone stany trionowe w kropkach II rodzaju w dobrej zgodności z obserwacjami eksperymentalnymi,
- zbadano zachowanie ekscytonów (magnetoekscytonów) lokalizowanych na zjonizowanych domieszkach w studni kwantowej,
- sformułowano zasady odróżniania typów potencjału wiążącego (I i II rodzaju kropki i osobliwego potencjału zjonizowanej domieszki) wyłącznie metodami optycznymi,
- zbadano wpływ bocznego pola elektrycznego na stany ekscytonowe kropki II rodzaju,
- zaproponowano model podczerwonego lasera kaskadowego na matrycy kropek II rodzaju pompowanego szybkim przełączaniem bocznego pola elektrycznego,
- zbadano defazowanie ładunków i spinów (w otoczeniu magnetycznym) ekscytonów w kropkach II rodzaju w ujęciu ogólnego schematu opisu defazowania wymienionego wyżej,
- zaproponowano model koherentnego źródła spolaryzowanych spinowo elektronów z matrycy kropek II rodzaju przy wykorzystaniu efektu wymrażania defazowania spinu w kropkach w otoczeniu magnetycznym.

Do pracy dołączone zostały (w postaci dodatku) prace autora dotyczące wyżej wymienionych zagadnień. Poza publikacjami odpowiadającymi tematowi rozprawy, dołączono też dwie współautorskie prace z zakresu plazmoniki w metalicznych układach nanoskopowych – mimo, że nie dotyczą kropek kwantowych, to jednak prowadzone są obecnie badania (także przy udziale autora) możliwości realizacji złożonych układów plazmonowo-ekscytonowych (kropki II rodzaju mogłyby być tu przydatne do precyzyjnego dostrajania warunków rezonansu) i w ten sposób rozpatrzenia zupełnie nowych możliwości bardziej złożonych układów, co wydaje się interesującym perspektywicznym obszarem.

Bibliografia

- [1] L. Jacak, P. Hawrylak, A. Wójs, [*Quantum Dots*], Springer Verlag, Berlin (1998).
- [2] Y. Masumoto, T. Takagahara, [*Semiconductor Quantum Dots*], Springer, Berlin (2002).
- [3] R. C. Ashoori, “Electrons in artificial atoms”, *Nature* **379**, 413 (1996).
- [4] R. C. Ashoori, H. L. Störmer, J. S. Weiner, N. L. Pfeifer, S. J. Pearton, K. W. Baldwin, K. West, “Single-electron capacitance spectroscopy of discrete quantum levels”, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 3088 (1992).
- [5] R. C. Ashoori, H. L. Störmer, J. S. Weiner, N. L. Pfeifer, K. W. Baldwin, K. West, “N-electron ground state energies of a quantum dot in magnetic field”, *Phys. Rev. Lett.* **71**, 613 (1993).
- [6] W. Hansen, T. P. Smith, K. Y. Lee, J. Brum, C. M. Knoedler, J. M. Hong, D. P. Kern, “Zeeman bifurcation of quantum-dot spectra”, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2168 (1989).
- [7] J. P. Lorke, A. and Kotthaus, K. Ploog, “Coupling of quantum dots on GaAs”, *Phys. Rev. Lett.* **64**, 2559 (1990).
- [8] B. Maurer, D. Heitmann, K. Ploog, “Single-electron charging of quantum-dot atoms”, *Phys. Rev. Lett.* **68**, 1371 (1992).
- [9] L. Jacak, J. Krasnyj, M. Korkusiński, A. Wójs, “Theory of radiative recombination from the metastable excited states of quantum dots”, *Phys. Rev. B* **57**, 9069 (1998).
- [10] L. Jacak, A. Wójs, P. Machnikowski, “Semiconductor quantum dots”, in [*Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology*], H. S. Nalwa, ed., American Scientific Publishers, Stevenson Ranch, CA (2004).

- [11] L. Jacak, P. Machnikowski, “Semiconductor quantum dots”, in [*Encyclopedia of Nanoscience and Nanotechnology*], H. S. Nalwa, ed., American Scientific Publishers, Stevenson Ranch, CA (2009).
- [12] M. A. Read, R. T. Bate, K. Bradshaw, W. M. Duncan, W. M. Frensley, J. Lee, H. D. Smith, “Spatial quantization in GaAs–AlGaAs multiple quantum dots”, *J. Vacuum Sc. Technol. B* **4**, 358 (1986).
- [13] C. Schüller, [*Inelastic Light Scattering of Semiconductor Nanostructures*], Springer VL, Berlin (2006).
- [14] D. Leonard, K. Pond, P. M. Petroff, “Critical layer thickness for self-assembled InAs islands on GaAs”, *Phys. Rev. B* **50**, 11687 (1994).
- [15] P. M. Petroff, S. T. Denbaars, “MBE and MOCVD growth and properties of selfassembled quantum dot in arrays in III-V semiconductor structures”, *Superlattices and Microstructures* **15**, 15 (1994).
- [16] P. Zoller, “Quantum information processing and communication. strategic report on current status, visions and goals for research in Europe”, <ftp://ftp.cordis.europa.eu/pub/ist/docs/fet/qip2-34.pdf> (2005).
- [17] R. Hughes, T. Heinrichs, “Quantum computation roadmap”, http://qist.lanl.gov/qcomp_map.shtml (2009).
- [18] M. A. Nielsen, I. L. Chuang, [*Quantum Computation and Quantum Information*], Cambridge University Press, Cambridge (2000).
- [19] D. Aharonov, “Quantum computation”, (1998).
- [20] S. Stenholm, K. A. Suominen, [*Quantum Approach to Informatics*], Wiley, New Jersey (2005).
- [21] J. Preskill, “Quantum information and computation”, Lecture notes available at <http://www.theory.caltech.edu/~preskill/ph229>.
- [22] J. D. Biamonte, V. Bergholm, J. Withfield, J. D. and Fitzsimons, A. Aspuru-Guzik, “Adiabatic quantum simulators”, *AIP Advances* **1**, 022126 (2011).
- [23] D. Bouwmeester, A. Eckert, A. Zeilinger, eds., [*The Physics of Quantum Information*], Springer-Verlag, Berlin Heidelberg (2000).
- [24] D. Loss, D. P. DiVincenzo, “Quantum computation with quantum dots”, *Phys. Rev. A* **57**, 120 (1998).
- [25] D. P. DiVincenzo, D. Bacon, J. Kempe, G. Burkard, K. B. Whaley, “Universal quantum computation with the exchange interaction”, *Nature* **408**, 339 (2000).

- [26] D. P. DiVincenzo, D. Loss, “Quantum information is physical”, *Superlattices and microstructures* **23**, 419 (1998).
- [27] W. Jacak, J. Krasnyj, R. Gonczarek, L. Jacak, [*Dekoherencja orbitalnych i spinowych stopni swobody w kropkach kwantowych*], Oficyna Wydawnicza PWr, Wrocław (2010).
- [28] W. Jacak, W. Donderowicz, L. Jacak, [*Introduction to quantum information processing and communication*], Printpap, Łódź (2011). ISBN 987-83-62098-91-0.
- [29] W. Jacak, J. Krasnyj, L. Jacak, W. Donderowicz, “Dephasing of QD exciton orbital and spin states due to hybridization with bulk collective excitations”, *Int. J. Mod. Phys. B* **10**, 1359 (2011).
- [30] K. Lis, S. Bednarek, B. Szafran, J. Adamowski, “Electrostatic quantum dots with designed shape of confinement potential”, *Physica E* **17**, 494 (2003).
- [31] S. Bednarek, B. Szafran, J. Adamowski, “Theoretical description of electronic properties of vertical gated quantum dots”, *Phys. Rev. B* **64**, 195303 (2001).
- [32] S. Bednarek, B. Szafran, K. Lis, J. Adamowski, “Modeling of electronic properties of electrostatic quantum dots”, *Phys. Rev. B* **68**, 155333 (2003).
- [33] M. Ciurla, J. Adamowski, B. Szafran, S. Bednarek, “Modelling of confinement potentials in quantum dots”, *Physica E* **15**, 261 (2002).
- [34] A. Gharaati, R. Khordad, “A new confinement potential in spherical quantum dots: Modified gaussian potential”, *Superlattices and Microstructures* **48**, 276 (2010).
- [35] S. Bednarek, B. Szafran, J. Adamowski, “Solution of the Poisson-Schrödinger problem for a single-electron transistor”, *Phys. Rev. B* **61**, 4461 (2000).
- [36] S. Bednarek, B. Szafran, J. Adamowski, “Many-electron artificial atoms”, *Phys. Rev. B* **59**, 13036 (1999).
- [37] J. Adamowski, M. Sobkiewicz, B. Szafran, S. Bednarek, “Electron pair in a gaussian confining potential”, *Phys. Rev. B* **62**, 4234 (2000).
- [38] B. Szafran, T. Chwiej, F. M. Peeters, S. Bednarek, J. Adamowski, B. Partoens, “Exciton and negative trion dissociation by an external electric field in vertically coupled quantum dots”, *Phys. Rev. B* **71**, 205316 (2005).

- [39] K. Brunner, U. Bockelmann, G. Abstreiter, M. Walther, G. Böhm, G. Tränkle, G. Weimann, “Photoluminescence from a single GaAs/AlGaAs quantum dot”, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 3216 (1992).
- [40] U. Bockelmann, K. Brunner, G. Abstreiter, “Relaxations and radiative decay of excitons in GaAs quantum dots”, *Solid State Electronics* **37**, 1109 (1994).
- [41] C. Pryor, “Geometry and material parameter dependence of InAs/GaAs quantum dot electronic structure”, *Phys. Rev. B* **60**, 2869 (1999).
- [42] L. Landin, M. S. Miller, P. M-E, C. E. Pryor, L. Samuelson, “Optical studies of individual InAs quantum dots in GaAs: few-particle effects”, *Science* **280**, 262 (1998).
- [43] C. Pryor, “Eight-band calculations of strained InAs/GaAs quantum dots compared with one-, four-, and six-band approximations”, *Phys. Rev. B* **57**, 7190 (1998).
- [44] C. Pryor, J. Kim, L. W. Wang, A. J. Williamson, A. Zunger, “Comparison of two methods for describing the strain profiles in quantum dots”, *J. Appl. Phys.* **83**, 2548 (1998).
- [45] E. Ribeiro, A. O. Govorov, W. Carvalho, G. Medeiros-Ribeiro, “Aharonov-Bohm signature for neutral polarized excitons in type-II quantum dot ensembles”, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 126402 (2004).
- [46] L. I. Schiff, [*Quantum Mechanics*], McGraw-Hill, New York (1955).
- [47] V. Fock, “Näherungsmethode zur Lösung des quantenmechanischen Mehrkörperproblems”, *Zeitschrift für Physik* **61**, 126 (1930).
- [48] A. Wójs, P. Hawrylak, S. Fafard, L. Jacak, “Electronic structure and magneto-optics of self-assembled quantum dots”, *Phys. Rev. B* **54**, 5604 (1996).
- [49] S. Fafard, D. Leonard, J. L. Merz, P. M. Petroff, “Selective excitation of the photoluminescence and energy levels of ultrasmall InGaAs/GaAs quantum dots”, *Appl. Phys. Lett.* **65**, 1388 (1994).
- [50] M. Bayer, A. Schmidt, A. Forchel, F. Faller, T. L. Reinecke, P. A. Knipp, A. A. Dremin, V. D. Kulakovskii, “Electron-hole transitions between states with nonzero angular momenta in the magnetoluminescence of quantum dots”, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 3439 (1995).

- [51] J. Krasnyj, W. Donderowicz, W. Jacak, M. Tytus, “Photoluminescence structure of highly excited quantum dots of type II”, *Radiation Measurements* **42**, 683 (2007). Proceedings of the 6th European Conference on Luminescent Detectors and Transformers of Ionizing Radiation (LUMDETR 2006).
- [52] S. Raymond, P. Hawrylak, C. Gould, S. Fafard, A. Sachrajda, M. Potemski, A. Wójs, S. Charboneau, D. Leonard, P. M. Petroff, J. L. Merz, “Exciton droplets in zero-dimensional systems in amagnetic field”, *Solid State Comm.* **101**, 883 (1997).
- [53] M. Tytus, J. Krasnyj, W. Jacak, A. Chuchmała, W. Donderowicz, L. Jacak, “Differences between photoluminescence spectra of type-I and type-II quantum dots”, *Journal of Physics: Conference Series* **104**, 012011 (2008).
- [54] L. Jacak, J. Krasnyj, D. Jacak, S. Bujkiewicz, “On 2D magnetoexciton localized by ionized donor in narrow quantum well”, *Phys. Low. Dim. Struct.* **9/10**, 99 (2000).
- [55] P. Vincente, A. Raymond, M. Kamal Saadi, B. Couzinet, M. Kubisa, W. Zawadzki, B. Etienne, “Bound magneto-acceptor and magneto-donor states in the conduction band of GaAs-GaAlAs heterostructures”, *Solid State Comm.* **96**, 901 (1995).
- [56] M. P. Lampert, “Mobile and immobile effective-mass-particle complexes in nonmetallic solids”, *Phys. Rev. Lett.* **1**, 450 (1958).
- [57] L. Stauffer, B. Stébé, “Binding energy of ionized-donor-bound excitons in two-dimensional semiconductors”, *Phys. Rev. B* **39**, 5345 (1989).
- [58] W. Y. Ruan, Y. C. Chang, “Stability of ion-bound excitons in two dimensions”, *Phys. Rev. B* **66**, 115314 (2002).
- [59] M. Tytus, W. Donderowicz, L. Jacak, “Exciton bound by distant ionized donor in two-dimensional quantum well”, *Appl. Phys. Lett.* (2011). (submitted).
- [60] F. M. Peeters, V. A. Schweigert, “Two-electron quantum disks”, *Phys. Rev. B* **53**, 1468 (1996).
- [61] P. Dean, J. L. Martin, “A method for determining the frequency spectra of disordered lattices in two-dimensions”, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences* **259**, 409 (1960).
- [62] P. Dean, “The vibrational properties of disordered systems: Numerical studies”, *Rev. Mod. Phys.* **44**, 127 (1972).

- [63] W. Salejda, M. H. Tyc, M. Just, [*Algebraiczne Metody Rozwiązywania Równania Schrödingera*], PWN (2002).
- [64] K. S. Dy, S.-Y. Wu, T. Spratlin, "Exact solution for the resolvent matrix of a generalized tridiagonal hamiltonian", *Phys. Rev. B* **20**, 4237 (1979).
- [65] Z. Zhao-bo, "A new method for obtaining the eigenvectors of a block-tridiagonal hamiltonian", *Journal of Physics C: Solid State Physics* **19**, L689 (1986).
- [66] K. L. Janssens, B. Partoens, F. M. Peeters, "Magnetoexcitons in planar type-II quantum dots in a perpendicular magnetic field", *Phys. Rev. B* **64**, 155324 (2001).
- [67] M. Abramowitz, I. A. Stegun, [*Handbook of Mathematical Functions*], National Bureau of Standards, Washington D.C. (1964).
- [68] L. Jacak, J. Krasnyj, D. Jacak, L. Bujkiewicz, "Far-infrared laser action from quantum dots created by electric-field focusing", *Phys. Rev. A* **65**, 063813 (2002).
- [69] L. Jacak, J. Krasnyj, D. Jacak, L. Bujkiewicz, "Far-infrared laser on quantum dots created by electric field focusing", *Microelectronic Eng.* **69**, 213 (2003).
- [70] L. Jacak, J. Krasnyj, D. Jacak, L. Bujkiewicz, "Urządzenie na kropkach kwantowych do generacji koherentnego promieniowania w dalekiej podczerwieni i sposób wytwarzania inwersji obsadzeń w matrycy kropek kwantowych zadawanych polem elektrycznym". Patent UP RP, PL nr 203033 B1 (2009).
- [71] J. Krasnyj, A. Chuchmała, W. Jacak, M. Tytus, W. Donderowicz, "Laser action in electrically driven quantum dot matrix", *Phys. Stat. Sol. (a)* **204**, 1950 (2007).
- [72] A. Chuchmała, J. Krasnyj, W. Jacak, M. Tytus, W. Donderowicz, L. Jacak, "Far-infrared laser action from parabolic quantum dots matrix", *Journal of Physics: Conference Series* **104**, 012012 (2008).
- [73] L. Jacak, J. Krasnyj, D. Jacak, A. Wójs, "2D quantum dot in in-plane electric field", *Phys. Low. Dim. Struct.* **7/8**, 107 (2002).
- [74] J. Krasnyj, M. Tytus, W. Donderowicz, W. Jacak, A. Chuchmała, "Gaussian quantum dots of type II in in-plane electric field", *Phys. Stat. Sol. (a)* **204**, 1944 (2007).

- [75] L. Jacak, J. Krasnyj, W. Jacak, R. Gonczarek, P. Machnikowski, “Unavoidable decoherence in semiconductor quantum dots”, *Phys. Rev. B* **72**, 245309 (2005).
- [76] W. Jacak, W. Donderowicz, L. Jacak, [*Introduction to quantum information processing and its practical realisation in quantum dot technology*], Politechnika Wroclawska, Wrocław (2010). e-skrypt.
- [77] A. C. Davydov, [*Solid state theory*], Nauka, Moscow (1976).
- [78] G. D. Mahan, [*Many-Particle Physics*], Kluwer, New York (2000).
- [79] K. Huang, A. Rhys, “Theory of light absorption and non-radiative transitions in F-centres”, *Proc. R. Soc. London A* **204**, 406 (1950).
- [80] L. Jacak, J. Krasnyj, W. Jacak, “Renormalization of the Fröhlich constant for electrons in a quantum dot”, *Phys. Lett. A* **304**, 168 (2002).
- [81] L. D. Landau, E. M. Lifshitz, [*Quantum Mechanics*], Butterworth-Heinemann, Oxford (1997).
- [82] S. Hameau, Y. Guldner, O. Verzelen, R. Ferreira, G. Bastard, J. Zeman, A. Lemaître, J. M. Gerard, “Strong electron-phonon coupling regime in quantum dots: evidence for everlasting resonant polarons”, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 4152 (1999).
- [83] S. Hameau, J. N. Isaia, Y. Guldner, E. Deleporte, O. Verzelen, R. Ferreira, G. Bastard, J. Zeman, J. M. Gérard, “Far-infrared magnetospectroscopy of polaron states in self-assembled InAs/GaAs quantum dots”, *Phys. Rev. B* **65**, 085316 (2002).
- [84] L. Jacak, J. Krasnyj, D. Jacak, P. Machnikowski, “Anharmonicity-induced polaron relaxation in GaAs/InAs quantum dots”, *Phys. Rev. B* **65**, 113305 (2002).
- [85] O. Verzelen, R. Ferreira, G. Bastard, “Polaron lifetime and energy relaxation in semiconductor quantum dots”, *Phys. Rev. B* **62**, R4809 (2000).
- [86] O. Verzelen, S. Hameau, Y. Guldner, J. M. Gérard, R. Ferreira, G. Bastard, “Electron phonon interaction and polaron effects in quantum dots”, *Jpn. J. Appl. Phys.* **40**, 1941 (2001).
- [87] O. Verzelen, R. Ferreira, G. Bastard, “Excitonic polarons in semiconductor quantum dots”, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 146803 (2002).
- [88] O. Verzelen, G. Bastard, R. Ferreira, “Energy relaxation in quantum dots”, *Phys. Rev. B* **66**, 081308 (2002).

- [89] P. Borri, W. Langbein, S. Schneider, U. Woggon, R. L. Sellin, D. Ouyang, D. Bimberg, “Ultralong dephasing time in InGaAs quantum dots”, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 157401 (2001).
- [90] U. Bockelmann, G. Bastard, “Phonon scattering and energy relaxation in two-, one- and zero-dimensional electron gases”, *Phys. Rev. B* **42**, 8947 (1990).
- [91] E. A. Muljarov, R. Zimmermann, “Exciton dephasing in quantum dots due to LO-phonon coupling: An exactly solvable model”, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 187401 (2007).
- [92] A. Suna, “Green’s function approach to exciton–phonon interaction”, *Phys. Rep.* **135**, A111 (1964).
- [93] A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, I. E. Dzyaloshinski, [*Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics*], Dover Publications, New York (1975).
- [94] A. L. Fetter, J. D. Walecka, [*Quantum Theory of Many Particle Systems*], McGraw-Hill, New York (1971).
- [95] V. L. Bonch-Bruевич, S. V. Tyablikov, [*The Green Function Method in Statistical Mechanics*], North-Holland, Amsterdam (1962).
- [96] C. A. Moskalenko, M. I. Shmiglyuk, B. I. Chinik, “O vlianii opticeskikh fononov na formu polos pogloschenia ekscitona Wanie-Motta”, *Fiz. Tverdogo Tela* **10**, 351 (1968).
- [97] S. Adachi, “GaAs, AlAs and AlGaAs: Material parameters for use in research and device applications”, *J. Appl. Phys.* **58**, R1 (1985).
- [98] D. Strauch, B. Dorner, “Phonon dispersion in GaAs”, *J. Phys: Cond. Matt.* **2**, 1457 (1990).
- [99] L. Jacak, P. Machnikowski, J. Krasnyj, P. Zoller, “Coherent and incoherent phonon processes in artificial atoms”, *Eur. Phys. J. D* **22**, 319 (2003).
- [100] R. Heitz, I. Mukhametzhanov, O. Stier, A. Madhukar, D. Bimberg, “Enhanced polar exciton-LO-phonon interaction in quantum dots”, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 4654 (1999).
- [101] A. García-Cristóbal, A. W. E. Minnaert, V. M. Fomin, J. T. Devrese, A. Y. Silov, J. E. M. Haverkort, J. H. Wolter, “Electronic structure and phonon-assisted luminescence in self-assembled quantum dots”, *Phys. Stat. Sol. (b)* **215**, 331 (1999).

- [102] T. Calarco, A. Datta, P. Fedichev, E. Pazy, P. Zoller, “Spin-based all-optical quantum computation with quantum dots: understanding and suppressing decoherence”, *Phys. Rev. A* **68**, 012310 (2003).
- [103] T. Story, R. R. Galazka, R. B. Frankel, P. A. Wolff, “Carrier-concentration induced ferromagnetism in PbSnMnTe”, *Phys. Rev. Lett.* **56**, 777 (1986).
- [104] H. Ohno, H. Munekata, T. Penney, S. von Milnár, L. L. Chang, “Magnetotransport properties of p-type In(Mn)As diluted magnetic III-V semiconductors”, *Phys. Rev. Lett* **68**, 2664 (1992).
- [105] J. K. Furdyna, “Diluted magnetic semiconductors”, *J. Appl. Phys.* **64**, R29 (1988).
- [106] T. Dietl, H. Ohno, F. Matsukura, “Hole-mediated ferromagnetism in tetrahedrally coordinated semiconductors”, *Phys. Rev. B* **63**, 195205 (2001).
- [107] D. Ferrand, J. Cibert, A. Wasiela, C. Bourgognon, S. Tatarenko, G. Fishman, T. Andrearczyk, J. Jaroszyński, S. Koleśnik, T. Dietl, B. Barbara, , D. Dufeu, “Carrier-induced ferromagnetism in $p - Zn_{1-x}Mn_xTe$ ”, *Phys. Rev. B* **63**, 085201 (2001).
- [108] T. Dietl, H. Ohno, F. Matsukura, J. Cibert, D. Ferrand, “Zener model description of ferromagnetism in zinc-blende magnetic semiconductors”, *Science* **287**, 1019 (2000).
- [109] T. Dietl, “Ferromagnetic semiconductors”, *Semicond. Sci. Technol.* **17**, 377 (2002).
- [110] H. Ohno, “Making nonmagnetic semiconductors ferromagnetic”, *Science* **281**, 951 (1998).
- [111] S. Das Sarma, E. H. Hwang, A. Kaminski, “Temperature-dependent magnetization in diluted magnetic semiconductors”, *Phys. Rev. B* **67**, 155201 (2003).
- [112] M. Csontos, G. Mihály, B. Jankó, T. Wojtowicz, X. Liu, J. K. Furdyna, “Pressure-induced ferromagnetism in (In,Mn)Sb dilute magnetic semiconductor”, *Nature Materials* **4**, 447 (2005).
- [113] W. Jacak, J. Krasnyj, L. Jacak, “Reducing of magnon-induced spin pure dephasing in quantum dots at low temperatures”, *Phys. Rev. B* **78**, 073303 (2008).
- [114] W. Jacak, J. Krasnyj, L. Jacak, S. D. Kaim, “Low-temperature properties of diluted magnetic semiconductors: Spin waves”, *Phys. Rev. B* **76**, 165208 (2007).

- [115] N. P. Kovalenko, J. Krasnyj, U. Krey, [*Physics of Amorphous Metals*], Wiley, New York (2001).
- [116] C. Kittel, [*Quantum Theory of Solids*], Wiley, New York (1987).
- [117] A. I. Akhieser, V. G. Baryakhtar, S. V. Peletminskii, [*Physics of Amorphous Metals*], North Holland, Amsterdam (1968).
- [118] A. V. Kitajev, A. Yu, “Fault-tolerant quantum computation by anyons”, *Ann. Phys.* **303**, 2 (2003).
- [119] Y. Semenov, V. Stephanovich, “Enhancement of ferromagnetism in uniaxially stressed dilute magnetic semiconductors”, *Phys. Rev. B* **67**, 195203 (2003).
- [120] R. Shioda, K. Ando, T. Hayashi, M. Tanaka, “Local structures of III-V diluted magnetic semiconductors $Ga_{1-x}Mn_xAs$ studied using extended x-ray-absorption fine structure”, *Phys. Rev. B* **58**, 1100 (1998).
- [121] T. Jungwirth, J. Mašek, K. Y. Wang, K. W. Edmonds, M. Sawicki, M. Polini, J. Sinova, A. H. MacDonald, R. P. Campion, L. X. Zhao, N. R. S. Farley, T. K. Johal, G. van der Laan, C. T. Foxon, B. L. Gallagher, “Low-temperature magnetization of (Ga,Mn)As semiconductors”, *Phys. Rev. B* **73**, 165205 (2006).
- [122] J. König, H.-H. Lin, A. H. MacDonald, “Theory of diluted magnetic semiconductor ferromagnetism”, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 5628 (2000).
- [123] J. König, Y. Gefen, “Coherence and partial coherence in interacting electron systems”, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 3855 (2001).
- [124] M. Berciu, R. N. Bhatt, “Spin waves in disordered III-V diluted magnetic semiconductors by a modified RPA approach”, *Phys. Rev. B* **66**, 085207 (2002).
- [125] J. Schliemann, J. König, A. H. MacDonald, “Monte Carlo study of ferromagnetism in (III,Mn)V semiconductors”, *Phys. Rev. B* **64**, 165201 (2001).
- [126] H. Ohno, A. Shen, F. Matsukura, A. Oiwa, A. Endo, S. Katsumoto, Y. Iye, “(Ga,Mn)As: A new diluted magnetic semiconductor based on GaAs”, *Appl. Phys. Lett.* **69**, 363 (1996).
- [127] F. Matsukura, H. Ohno, A. Shen, Y. Sugawara, “Transport properties and origin of ferromagnetism in (Ga,Mn)As”, *Phys. Rev. B* **57**, R2037 (1998).
- [128] N. Theodoropoulou, A. F. Hebard, M. E. Overberg, C. R. Abernathy, S. J. Pearton, S. N. G. Chu, R. G. Wilson, “Magnetic and structural properties of Mn-implanted GaN”, *Appl. Phys. Lett.* **78**, 3475 (2001).

- [129] S. Sonoda, S. Shimizu, T. Sasaki, Y. Yamamoto, H. Hori, “Molecular beam epitaxy of wurtzite (Ga,Mn)N films on sapphire(0001) showing the ferromagnetic behaviour at room temperature”, *J. Cryst. Growth* **273**, 1358 (2002).
- [130] D. Pines, [*Elementary Excitations in Solids*], Benjamin, New York (1963).
- [131] J. Seufert, M. Scheibner, G. Bacher, A. Forchel, S. Lee, M. Dobrowolska, J. K. Furdyna, “Dynamics of zero-dimensional excitons in a semimagnetic environment”, *Phys. Stat. Sol. (b)* **229**, 727 (2002).
- [132] H. Schömig, M. K. Welsch, G. Bacher, A. Forchel, S. Zaitsev, A. A. Maksimov, V. D. Kulakovskii, S. Lee, M. Dobrowolska, J. K. Furdyna, “Photoluminescence spectroscopy on single CdSe quantum dots in a semimagnetic ZnMnSe matrix”, *Physica E* **13**, 512 (2002).
- [133] J. Seufert, G. Bacher, M. Scheibner, A. Forchel, S. Lee, M. Dobrowolska, J. K. Furdyna, “Dynamical spin response in semimagnetic quantum dots”, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 027402 (2002).
- [134] S. V. Vonsovsky, [*Magnetism*], Wiley, New York (1974).
- [135] W. Jacak, W. Donderowicz, L. Jacak, [*Wstęp do informatyki kwantowej*], Politechnika Wroclawska, Wrocław (2004). e-skrypt.
- [136] W. Jacak, W. Donderowicz, J. Jacak, L. Jacak, [*Wstęp do informatyki i kryptografii kwantowej*], Oficyna Wydawnicza Politechniki Wroclawskiej, Wrocław (2011). ISBN 978-83-7493-604-0.
- [137] P. Shor, “Algorithms for quantum computation: discrete logarithms and factoring”, *IEEE Press* (1994). Proceedings of 35th Annual Symposium on Foundations of Computer Science, Los Alamitos, CA.
- [138] J. Preskill, “Topological quantum computation”, Lecture Notes for Phys. 219, California Inst. Tech. (2005).
- [139] A. Kitaev, “Quantum computations: algorithms and error correction”, *Russ. Math. Surv.* **52**, 1191 (1997).
- [140] M. Johnson, M. Amin, S. Gildert, T. Lanting et al., “Quantum annealing with manufactured spins”, *Nature* **473**, 194 (2011).
- [141] H. Neven (Google Inc.), G. Rose (D-Wave) et al., “Demonstration: Binary classification using hardware implementation of quantum annealing”, Neural Information Processing Systems 2009, Conference Proceedings, www.google.com/googleblogs/pdfs/nips_demoreport_120709_research.pdf.

- [142] N. Gershenfeld, [*The Physics of Information Technology*], Cambridge University Press, Cambridge (2000).
- [143] D. Zubarev, [*Nierównowagowa fizyka statystyczna*], 1976, Warszawa (PWN).
- [144] L. D. Landau, E. M. Lifschic, [*Mechanika kwantowa*], PWN, Warszawa (1979).
- [145] A. Aspect, P. Grangier, G. Roger, “Experimental realization of Einstein-Podolsky-Rosen-Bohm Gedankenexperiment: A new violation of Bell’s inequalities”, *Phys. Rev. Lett.* **49**, 91 (1982).
- [146] J. S. Bell, “On the Einstein-Podolsky-Rosen paradox”, *Physics* **1**, 195 (1964).
- [147] W. H. Żurek, “Environment-induced superselection rules”, *Phys. Rev. D* **26**, 1862 (1982).
- [148] W. H. Żurek, “Decoherence”, *Rev. Modern Phys.* **75**, 715 (2003).
- [149] J. Jacak, *Zastosowanie grup warkoczowych w fizyce i w informatyce*, Master’s thesis, Politechnika Wroclawska (2007).
- [150] [*Encyklopedia fizyki współczesnej*], PWN, Warszawa (2003).
- [151] [*Encyklopedia fizyki*], PWN, Warszawa (1974).
- [152] C. H. Bennett, G. Brassard, C. Crépeau, R. Jozsa, A. Peres, W. K. Wootters, “Teleporting an unknown quantum state via dual classical and epr channels”, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 1895 (1993).
- [153] D. Bouwmeester, J. W. Pan, K. Mattle, M. Eibl, H. Weinfurter, A. Zeilinger, “Experimental quantum teleportation”, *Nature* **390**, 575 (1997).
- [154] W. K. Wootters, W. H. Żurek, “A single quantum cannot be cloned”, *Nature* **299**, 802 (1982).
- [155] A. K. Pati, S. L. Braunstein, “Impossibility of deleting an unknown quantum state”, *Nature* **404**, 164 (2000).
- [156] A. K. Pati, S. L. Braunstein, “Quantum deleting and signalling”, *Phys. Lett. A* **315**, 208 (2003).
- [157] W. Żurek, “Quantum cloning: Schrödinger’s sheep”, *Nature* **404**, 130 (2000).

- [158] H. Barnum, C. M. Caves, C. A. Fuchs, R. Jozsa, B. Schumacher, “Non-commuting mixed states cannot be broadcast”, *Phys. Rev. Lett.* **76**, 2818 (1996).
- [159] D. Gottesman, I. L. Chuang, “Demonstrating the viability of universal quantum computation using teleportation and single-qubit operations”, *Nature* **402**, 390 (1999).
- [160] K. Shimoda, [*Introduction to Laser Physics*], Springer, Berlin (1986).
- [161] A. Ekert, J. Rarity, P. Tapster, G. M. Palma, “Practical quantum cryptography based on two-photon interferometry”, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 1293 (1992).
- [162] P. D. Townsend, “Quantum cryptography on multi-user optical fibre networks using wavelength-division multiplexing”, *Electron. Lett.* **33**, 188 (1997).
- [163] D. P. DiVincenzo, “The physical implementation of quantum computation”, *Fortschr. Phys.* **48**, 771 (2000).
- [164] E. Knill, “Quantum computing with realistically noisy devices”, *Nature* **434**, 39 (2005).

Dodatek A

Uwagi o informatyce kwantowej

(na podstawie e-skryptu „Wstęp do informatyki kwantowej”, W. Jacak, W. Donderowicz, L. Jacak, Politechnika Wroclawska 2004 (oraz nowej edycji 2010) [135], e-skryptu „Introduction to quantum information processing and its practical realisation in quantum dot technology”, W. Jacak, W. Donderowicz, L. Jacak, Politechnika Wroclawska 2010 [76], oraz książek „Introduction to quantum information processing and communication”, W. Jacak, W. Donderowicz, L. Jacak, Printpap 2011 (ISBN 987-83-62098-91-0) [28], „Wstęp do informatyki i kryptografii kwantowej”, W. Jacak, W. Donderowicz, J. Jacak, L. Jacak, Oficyna Wydawnicza PWr 2011 (ISBN 978-83-7493-604-0) [136])

A.1 Ograniczenia klasycznej informatyki

Gwałtowny rozwój informatyki w ostatnich dziesięcioleciach związany był z postępującą miniaturyzacją obwodów scalonych i innych elementów komputerów i gwałtownym (eksponencjalnym) wzrostem ilości przetwarzanych informacji. Wzrost ten ujmowany jest często w postaci tzw. prawa Moora (Gordon Moore, jeden z założycieli firmy Intel), wg którego liczba tranzystorów w obwodach scalonych podwaja się w stałych odstępach czasowych (co dwa lata) – prowadzi to do eksponencjalnego wzrostu złożoności struktur obliczeniowych, ale równocześnie też wymaga miniaturyzacji. Standardowe techniki wytwarzania obwodów scalonych wykorzystują procedury foto-litograficzne o rozdzielczości ograniczonej przez długość fali stosowanego światła, przy pomocy którego naświetla się wzór płytki półprzewodnikowej obwodów scalonych, podlegającej następnie chemicznemu wytrawianiu. Dla światła widzialnego dolna granica długości fali to około 400 nm, a jej obniżenie dla celów litograficznych wymaga stosowania krótszego światła nadfioletowego, dla którego z kolei potrzebne są specjalne techniki optyczne. Obecnie osiąga się skalę miniaturyzacji w nadfioletowej litografii w zakresie do 40 nm.

W technikach litograficznych przy masowej produkcji układów scalonych początkowo wykorzystywano światło widzialne 436 nm oraz bliski ultrafiolet 365 nm, uzyskiwany w lampach rtęciowych. Kiedy jednak rozmiar układu scalonego zmniejszono poniżej 500 nm, promieniowanie o tych długościach fal nie mogło już być dłużej użyteczne. Wówczas do naświetlania fotomasek zaczęto wykorzystywać lasery ekscymerowe [ekscymery to kompleksy atomów na różnym stopniu wzbudzenia; w laserach ekscymerowych stosowane są gazy szlachetne z fluorem] emitujące promieniowanie w zakresie średniego i dalekiego ultrafioletu, w tym lasery KrF o długości fali 248 nm i ArF o długości fali 193 nm. Aktualnie rozwijaną technologią jest fotolitografia o długości fali 193 nm, która w połączeniu z takimi procesami jak litografia immersyjna oraz tzw. podwójne odwzorowanie, umożliwia produkcję układów scalonych o rozmiarze charakterystycznym około 45 nm.

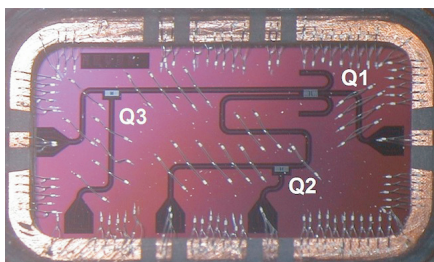
Dalsza miniaturyzacja ograniczona jest jednak nie tylko wymogami litograficznych technik, ale przede wszystkim granicami atomowymi samych struktur krystalicznych. Kiedy osiągnięta jest skala atomowa, wszystkimi zjawiskami rządzi mechanika kwantowa, co prowadzi do odmiennych od klasycznych efektów. W półprzewodnikowych strukturach kwantowe efekty pojawiają się nawet w skali ponad 10 krotnie wyższej niż atomowa (w skali 10 – 20 nm), głównie z powodu małej masy efektywnej nośników w wielu półprzewodnikowych materiałach, co znajduje odzwierciedlenie w nieklasycznym zachowaniu tzw. kropek kwantowych [1, 2].

Oczekiwania dalszego wzrostu mocy obliczeniowej systemów informatycznych zbiegają się jednak z nowymi koncepcjami informatycznymi, a mianowicie z informatyką kwantową [16, 17, 18, 19, 28, 20, 21, 23]. Ta nowa idea wiąże się z wykorzystaniem kwantowego a nie klasycznego, jak do tej pory, nośnika informacji. Nośnikiem tym miałyby być stan kwantowego układu, w najprostszym przypadku qubit, zastępującego klasyczny bit. Zarówno qubit (stan dwupoziomowego układu kwantowego), jak i możliwości przetwarzania informacji kwantowej, w eksponencjalny sposób przeważają nad możliwościami obecnej klasycznej informatyki. Wiele problemów o eksponencjalnej złożoności dla klasycznego sposobu przetwarzania informacji mogłoby zostać znacząco (eksponencjalnie, a w innych przypadkach potęgowo) przyspieszonych, co prowadziłoby do możliwości pokonania eksponencjalnych trudności w czasie rzeczywistym. Ogromną uwagę skupił ogłoszony przez Petera Shora (IBM) w 1994 roku kwantowy algorytm faktoryzacji, o eksponencjalnym przyspieszeniu w stosunku do algorytmów klasycznych [137]. Wielkie zainteresowanie tym wynikiem wiąże się przede wszystkim z faktem, że o klasyczną złożoność obliczeniową faktoryzacji (czyli znajdowania liczb pierwszych) opiera się znany protokół kryptograficzny RSA. Złamanie zabezpieczeń kryptografii klasycznej przez komputer kwantowy okazuje się zatem realnym zagrożeniem dla bezpieczeństwa informatycznego współczesnych syste-

mów. Udana konstrukcja zaledwie kilkuset (1000) qubitowego komputera kwantowego (z uwagi na eksponencjalny wzrost możliwości przetwarzania informacji wraz z liczbą qubitów, a 2^{1000} to już znacznie więcej niż np. liczba atomów we Wszechświecie) oznaczałoby przejęcie kontroli nad wszelkimi klasycznymi systemami informatycznymi, co zapewne stanowi problem strategiczny i przełomowy nie tylko w zakresie technologii informatycznych. Mimo ogromnych wysiłków w kierunku zbudowania wieloqubitowego komputera kwantowego, skalowalnego, z tzw. kwantową korektą błędów, nie udało tego jeszcze osiągnąć. Na przeszkodzie stoi dekoherencja wywoływana przez otoczenie i powodująca niekontrolowany wpływ informacji, a zatem nieuniknione błędy. Według znanych obecnie schematów kwantowej korekty błędów konieczne jest zwielokrotnienie układów, a to z kolei wzmacnia dekoherencję. Rozwiązaniem byłoby znalezienie takiego układu kwantowego, w którym szybkość sterowanych operacji kwantowych byłaby aż 10^6 razy większa od prędkości niszczącej dekoherencji (ujęte jest to w postaci tzw. kryteriów DiVincenzo). W licznych badanych układach kwantowych realnych qubitów, w technologii kropek kwantowych i innych nanostruktur sterowanych światłem lub polem magnetycznym, czy w zakresie rozwiązań optyki kwantowej lub spulapkowanych jonów, osiągnięto przewagę prędkości kwantowych operacji logicznych nad dekoherencją tylko o czynnik 10^3 [136, 27, 28], co nie pozwala na implementację kwantowej korekty błędów i skalowanie kwantowego komputera. Działają one tylko jako kilkuqubitowe demonstratory technologii bez korekty błędów.

Jednakże rozważane od kilku lat koncepcje topologicznych komputerów kwantowych o przewadze szybkości operacji logicznych nad dekoherencją osiągających nawet poziom 10^{30} , mogłyby zdecydowanie przyczynić się do przełomu [118, 138, 139]. Tu jednak trudności pojawiają się przy praktycznym sterowaniu topologicznymi stopniami swobody w realnych strukturach (rozważane są układy 2D w konfiguracji Halla w silnym polu magnetycznym). Zaletą topologicznych stopni swobody jest ich globalność, co czyni je odpornymi na lokalną z natury dekoherencję (np. zapętlona zamknięta krzywa zachowuje tę cechę mimo lokalnych deformacji).

Doniesienia z ostatnich miesięcy wskazują jednak na możliwy postęp przy wykorzystaniu pośredniej drogi, a mianowicie układów nadprzewodzących, charakteryzujących się kwantowymi cechami w zakresie przestrzennym kilkuset odległości międzyatomowych w kryształach (takie są właśnie rozmiary funkcji falowych opisujących rozmiary par Coopera w nadprzewodnikach). Ta przewaga geometrycznej rozciągłości wydaje się spowalniać dekoherencję odbywającą się na kilkaset razy mniejszej skali międzyatomowej. Dobrze opanowane techniki nadprzewodnictwa zbiegają się tu z możliwością osiągnięcia wymagań kryteriów DiVincenzo. W marcu 2012 IBM ogłosiło zbudowanie skalowalnej bramki do komputera kwantowego o wymaganych parametrach, właśnie w technologii nadprzewodnikowej – rys. A.1.



Rys. A.1. Standardowa 3-qubitowa nadprzewodnikowa bramka do skalowalnego komputera kwantowego (IBM).

Innym ważnym osiągnięciem jest ogłoszenie w 2011 roku konstrukcji 128 qubitowego komputera kwantowego, ale wykorzystującego technikę kwantowego wyżarzania, a nie splątania kwantowego [140, 141]. Oznacza to, że taki komputer kwantowy przydatny jest do szybkiego rozwiązywania zagadnień optymalizacji, ale nie jest w pełni uniwersalną maszyną kwantową. Komputer ten, pod nazwą D-Wave-One (kanadyjskiej firmy o nazwie D-Wave) wykonany został w technologii nadprzewodnikowej, co wymaga chłodzenia do temperatur helowych bliskich zera absolutnego – stąd gabaryty D-Wave-One to $3 \times 3 \times 3$ metry. Cena tego urządzenia to 10 mln \$ i zostało ono zakupione przez Lockheed-Martin do badań wojskowych i także przez Google dla zastosowania w silniku nowej wyszukiwarki, rys. A.2.



Rys. A.2. 128-qubitowy komputer kwantowy D-Wave-One.

Przykłady te wskazują na zdecydowane postępy w kierunku zbudowania dużego uniwersalnego komputera kwantowego, co oznaczać będzie przełom technologiczny w całym obszarze IT.

A.2 Porównanie informacji klasycznej i kwantowej

Każda informacja posiada swój nośnik – jest to stan materialnego obiektu np. namagnesowanie taśmy magnetycznej, wypalona laserowo ścieżka w CD, naładowane lub nie kondensatory w elementach pamięci komputera, zapisana kartka papieru, książka, taśma filmowa, przekaz sygnału przy pomocy fali elektromagnetycznej (radiowej, telewizyjnej, optycznej – informacja wzrokowa), przekaz sygnału przy pomocy fali akustycznej (informacja dźwiękowa), połączenia sieci neuronów (myśl i świadomość) itp.. Nośnikami informacji klasycznej są makroskopowe układy fizyczne, czyli układy opisywane przez klasyczną mechanikę, elektrodynamikę, optykę czy termodynamikę. Wielkości fizyczne charakteryzujące układy klasyczne mogą być i są powszechnie wykorzystywane informatycznie – w wyniku ich klasycznego pomiaru można odzyskać wartość liczbową (wyrażoną liczbą rzeczywistą) zapisanej w nich informacji. Pomiar ten może być wykonywany przy pomocy zmysłów obserwatora – np. ocena rozmiarów, odległości, barwy, prędkości, temperatury, kształtu i innych klasycznych charakterystyk otaczających obserwatora obiektów. Należy tu zauważyć, że rozdzielczość pomiarowa zmysłów obserwatora stoi w istocie za klasycznym obrazem świata budowanym w oparciu o jego postrzeganie. Do skali tej odnosi się pojęcie makroskopowych obiektów i wielkości odpowiadających właśnie skali i rozdzielczości zmysłów ludzi. Przesunięcie tej skali postrzegania w kierunku i mniejszych i większych zakresów, nastąpiło dopiero po skonstruowaniu przyrządów zwiększających możliwości obserwacyjne, jak np. mikroskopu, teleskopu, różnego rodzaju aparatów pomiarowych. W każdym z tych przypadków mamy do czynienia z pomiarami lub obserwacjami klasycznych charakterystyk obiektów fizycznych, czyli klasycznej informacji, choć niedostępnej w wielu przypadkach nieuzbrojonym zmysłom. Wydaje się zatem słuszne traktować zmysły, ewentualnie wyposażone w urządzenia zwiększające rozdzielczość obserwacji, jako mierniki klasycznej informacji, dostarczającej jej następnie, również zakodowanej w fizycznym nośniku impulsów nerwowych, do struktur mózgu obserwatora, gdzie ulokowana jest świadomość, także w fizycznych strukturach neuronów i ich połączeń (choć jeszcze nie rozpoznana co do charakteru nośnika informacji w przypadku świadomości).

Podobnie komputer klasyczny jest przystosowany do pobierania, przetwarzania i wysyłania klasycznej informacji wykorzystując klasyczne nośniki informacji w postaci klasycznych ładunkowo-prądowych lub magnetycznych, czy elektromagnetycznych charakterystyk. Przy pomocy tych charakterystyk udaje się z powodzeniem definiować bity i organizować ich przetwarzanie (np. naładowany i nienaładowany kondensator, przepływ prądu elektrycznego w tranzystorze lub jego brak, pole magnetyczne lub jego brak itp.). Rozróżnienie dwóch stanów klasycznego obiektu, w celu kodowania w nich bitu informacji klasycznej, odbywa się zawsze z określoną dokładnością. Jeśli np. jest to stan przepływającego prądu elektrycznego, to nie istotne jest, czy zawsze jest to przepływ dokładnie tej samej

liczby elektronów w jednostce czasu, ale wystarcza tylko przybliżona równość, ponieważ nawet małe prądy, np. o natężeniu $1 \mu\text{A}$ to 10^{-6} C/s, a 1 C to około 10^{19} elektronów, czyli prąd o natężeniu $1 \mu\text{A}$ odpowiada przepływowi około 10^{13} elektronów na sekundę i różnice o kilka elektronów nie mają żadnego znaczenia. Podobnie np. długość stołu jest niezależna od tego czy odpadło od niego, czy nie, kilka atomów. Klasyczny obraz rzeczywistości jest najwyraźniej więc przybliżony i słuszny tylko w makroskopowej skali do momentu kiedy różnica o kilka elektronów lub kilka atomów nie zacznie być istotna – a to jednak jest nieuniknione w miarę zwiększania skali miniaturyzacji.

Ten pozorny i przybliżony obraz rzeczywistości w makroskopowej klasycznej skali prowadzi do ugruntowania pojęcia klasycznego pomiaru, czyli sposobu odczytywania informacji klasycznej zakodowanej w stanie danej wielkości fizycznej klasycznego nośnika informacji – makroskopowego obiektu.

Pomiar klasyczny makroskopowego obiektu jest nieniszczący i powtarzalny. Nie wyróżnia danego pomiaru, ani obserwatora, nie zmienia też stanu mierzonego układu. Możliwy jest wielokrotny (powtarzalny) pomiar, w wyniku którego otrzymuje się podobny rezultat, który można scharakteryzować przy pomocy rzeczywistej zmiennej losowej o rozkładzie odzwierciedlającym dokładność pomiaru (przyrządu pomiarowego, np. skali linijki o określonej dokładności lub innego miernika) i wpływy otoczenia (szумы/zaburzenia, w przypadku otwartych układów, np. zaburzenia mechaniczne – drgania, zaburzenia termiczne, zaburzenia elektryczne, czy elektromagnetyczne itp.) [142]. Powtarzalność ta nadaje informacji klasycznej abstrakcyjny charakter, chociaż jest ona fizyczna w sensie swojego makroskopowego nośnika. Ten abstrakcyjny charakter informacji klasycznej wiąże się z jej zachowaniem podczas pomiaru i możliwością powtarzania pomiaru, co pozornie 'odrywa' informację klasyczną od jej nośnika (zawsze potencjalnie dostępnego i przez to jakby nieistotnego, bo nie wpływającego na poszczególne pomiary dowolnie zwielokrotniane). Informacja klasyczna nabiera matematycznego i przez to abstrakcyjnego charakteru zmiennej losowej – wyników powtarzanych pomiarów obarczonych jednak pewnym błędem pomiarowym.

Takie makroskopowe wielkości fizyczne opisywane są termodynamiką statystyczną (pozwalającą ująć zaburzenia i szумы uniemożliwiające absolutną dokładność klasycznego pomiaru obok skończonej też tylko dokładności samego miernika) — stąd wynika głęboki związek podstaw teorii informacji i fizyki statystycznej. W obu dziedzinach entropia odgrywa podstawową rolę. Entropia Shannona [142] w teorii informacji i entropia termodynamiczna wprowadzana przez II zasadę termodynamiki [143], to w istocie ta sama wielkość. Entropia odzwierciedla zasadniczą cechę makroskopowych układów — ich chaotyzację, czyli 'zapominanie' o mikroskopowych warunkach początkowych (w wyniku nawet drobnych niekontrolowanych wpływów otoczenia, następuje ciągle modyfikowanie warunków początkowych i w przypadku silnej reakcji układu na nawet drobne takie

zaburzenia, układ szybko 'zapomina' o wyjściowych warunkach początkowych) co prowadzi do średnich zachowań zgodnie z regułami prawdopodobieństwa. Takie probabilistyczne zachowanie ujmowane jest w ramach termodynamiki i fizyki statystycznej – układ przejawia się częściej w tych stanach, które są bardziej prawdopodobne. Prostą ilustracją tego faktu może być przykład z N kulami losowo rzucanymi do N pojemników. Prawdopodobieństwo, że wszystkie N kul wpadnie do jednego pojemnika odpowiada liczbie N zdarzeń (ponieważ jest N pojemników). Natomiast prawdopodobieństwo stanu końcowego, w którym w każdym pojemniku jest jedna kula, wiąże się z $N!$ zdarzeniami (bo kule można przedstawiać, a ilość przestawień określa ilość permutacji N elementów, czyli $N!$). Dla dużych N (np. dla N rzędu liczby Avogadro $\sim 10^{23}$) przewaga $N!$ nad N jest ogromna i dlatego równomierne rozłożenie kul jest najbardziej prawdopodobne. Dlatego, na przykład, gaz wypuszczony ze zbiornika wypełnia w krótkim czasie całe pomieszczenie równomiernie.

Wymienić można główne cechy informacji klasycznej:

- informacja klasyczna – wielkości fizyczne charakteryzujące makroskopowe układy fizyczne,
- pomiar klasyczny nieniszczący i powtarzalny – informacja klasyczna (wynik pomiaru) nabiera charakteru abstrakcyjnego (nie wyróżnia konkretnego pomiaru ani obserwatora),
- informacja klasyczna (fizyczne wielkości makroskopowych układów) spełnia reguły termodynamiki (w tym II zasadę termodynamiki i posługuje się pojęciem entropii).

Jednakże wszystkie układy makroskopowe mają atomową mikroskopową budowę i w tej skali pojedynczych atomów, czy elektronów lub fotonów, przejawia się nieklasyczny, i niemakroskopowy, ale kwantowy ich charakter. Kwantowy obraz rzeczywistości jest zupełnie inny od obrazu klasycznego. Można zatem oczekiwać, że własności obiektów w skali kwantowej będą nośnikami innej niż klasyczna informacji. Nazwać ją można informacją kwantową. Informacja ta nie jest dostępna dla świadomości obserwatora (ta ostatnia dostosowana jest do odbioru i przetwarzania informacji klasycznej).

Informacja kwantowa to informacja zawarta w fizycznym nośniku kwantowym. *Nie ma ona interpretacji klasycznej*, nie jest bowiem mierzalna klasycznie.

Można przełożyć wyłącznie niewielką część informacji kwantowej na informację klasyczną (czyli na liczby rzeczywiste, 'rozumiane' przez świadomość obserwatora jako wynik pomiaru) przy pomocy pomiaru układu kwantowego według tzw. schematu von Neumanna. Schemat ten dopuszcza możliwość uzyskania tylko fragmentarycznej klasycznej informacji o zupełnie nieklasycznej i daleko większej informacji kwantowej, która nie ma w całości żadnej klasycznej interpretacji. Ta

niewielka część informacji kwantowej, która jest dostępna w ramach schematu von Neumanna jest w ilości proporcjonalnej liniowo względem zasobów (czyli liczby cząstek). Kwantowa zawartość informatyczna w układzie wielu cząstek rośnie natomiast eksponencjalnie z liczbą cząstek (jest to wymiar przestrzeni Hilberta układu wielocząstkowego, narastający eksponencjalnie wraz z zasobami). Niedostępność większości informacji kwantowej w wyniku pomiarów von Neumanna leży w samym centrum mechaniki kwantowej i jest niezrozumiałym intuicyjnie wynikiem obserwacji świata. Mechanika kwantowa może być krótko ujęta jako brak trajektorii fazowej cząstek. Trajektorja klasyczna zarówno w przestrzeni fazowej jak i położeniowej określana jest równaniem Newtona:

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = \mathbf{F}(\mathbf{r}, \frac{d\mathbf{r}}{dt}, t). \quad (\text{A.1})$$

Jest to równanie różniczkowe drugiego rzędu i rozwiązanie określa zarówno położenie $\mathbf{r}(t)$ i prędkość $\mathbf{v}(t) = \frac{d\mathbf{r}}{dt}$ i to w jednoznaczny sposób przy danych warunkach początkowych, $\mathbf{r}(0) = \mathbf{r}_0$ i $\mathbf{v}(0) = \mathbf{v}_0$. Jednoznaczność trajektorii przechodzącej przez dane warunki początkowe wynika z twierdzenia o istnieniu i jednoznaczności rozwiązań równań różniczkowych (spełniających tzw. warunki Lipshitz'a gładkości funkcji – dla siły $\mathbf{F}(\mathbf{r}, \frac{d\mathbf{r}}{dt}, t)$ ciągłej od swoich argumentów takie warunki są spełnione, a ciągłość ta zwykle odpowiada realności klasycznego opisu).

Ten klasyczny obraz trajektorii znika w mechanice kwantowej. Znika w ten sposób też i pojęcie klasycznej cząstki (punktu materialnego odbywającego dynamikę wzdłuż klasycznej trajektorii [jeśli punkt materialny się nie porusza, to też jest to trajektorja z prędkością zero]). W mechanice kwantowej pojęcie cząstki nie wiąże się z trajektorią, która tu nie istnieje. Zastępuje ją pojęcie stanu kwantowego (cząstki) modelowanego przez funkcję falową, w ogólności zespoloną, której kwadrat modułu określa gęstość prawdopodobieństwa znalezienia cząstki lub raczej jej przestrzennego rozmycia. Pojawia się jakby chmura materii zamiast klasycznego zlokalizowanego punktu materialnego, ale ta chmura nie jest złożona z punktów materialnych – bo takie nie istnieją w mechanice kwantowej. Zauważalny jest tu brak możliwości klasycznej interpretacji. Rozmycie tej chmury wyrażają zasady kwantowej nieoznaczoności. W szczególności zasada nieoznaczoności Heisenberga odnosi się do rozmycia położenia i pędu,

$$\Delta x \Delta p_x \simeq \hbar; \quad \hbar = 1.05 \times 10^{-34} \text{ Js}, \quad (\text{A.2})$$

i wyraża właśnie kwantową niemożność równoczesnego określenia położenia i pędu, czyli brak trajektorii fazowej.

Pewne wyobrażenie o zasadzie nieoznaczoności może dostarczyć opis pomiaru położenia cząstki. Żeby określić to położenie trzeba 'zobaczyć' tę cząstkę – ale zobaczyć można tylko przy pomocy światła, najlepiej używając mikroskopu. Zdolność rozdzielcza mikroskopu ograniczona jest jednak przez długość fali świetlnej.

Światło widzialne o długości fali $\lambda \sim 400 - 700$ nm nie pozwala na bardziej precyzyjne określenie położenia niż ta długość (niezależnie od konstrukcji mikroskopu). Żeby dokładniej określić położenie cząstki potrzebne było by światło o mniejszej długości fali – rentgenowskie czy promieniowanie gamma. Ale im krótsza długość fali, tym większa energia porcji światła – fotonu,

$$\hbar\omega = \hbar\frac{2\pi}{T} = \hbar\frac{2\pi c}{\lambda} \quad (\text{A.3})$$

i w czasie 'ogłędania' cząstki przy pomocy tak krótkiej fali, wysokoenergetyczny foton uderza cząstkę i nadaje jej nieprzewidywalną prędkość, o której nic wtedy nie wiemy. W wyniku tego 'ogłędania' cząstka traci swoje poprzednie położenie i odbiega w nieprzewidywalnym kierunku.

Ta ilustracja pokazuje na związek braku trajektorii w mechanice kwantowej i niemożności uzyskania klasycznej informacji o stanie kwantowym (czyli o informacji kwantowej) – na przeszkodzie stoją zasady nieoznaczoności. Te z kolei wyznaczają ilość dostępnej klasycznej informacji – i właśnie dla wielocząstkowego układu ta ilość rośnie proporcjonalnie do ilości cząstek, co jest znikomo małym fragmentem informacji kwantowej narastającej eksponencjalnie.

Modelem matematycznym informacji kwantowej (czyli stanu kwantowego) jest funkcja falowa (dla zamkniętych układów), lub macierz gęstości (ta ostatnia dla otwartych układów, oddziałujących z otoczeniem; będzie to przedstawione w kolejnych podrozdziałach). Pomiar układu kwantowego jest *niszczący i niepowtarzalny, wyróżnia konkretny pomiar i obserwatora, ponadto jest niedeterministyczny, tzn. przypadkowy*. Sama ewolucja zamkniętego układu kwantowego jest deterministyczna – jest to unitarna ewolucja, która zachowuje wymiar przestrzeni Hilberta [unitarne przekształcenia przeprowadzają bazy w przestrzeniach liniowych w inne bazy w tych przestrzeniach nie zmieniając wymiaru, a przestrzenie Hilberta są liniowymi przestrzeniami; odpowiada to zachowaniu entropii, która wiąże się z wymiarem przestrzeni].

Układ kwantowy otwarty, czyli oddziałujący z otoczeniem, nie podlega jednak unitarnej ewolucji. Wtedy entropia i informacja nie jest w ogólności zachowywana i najczęściej w takiej sytuacji wypływa do otoczenia w niekontrolowany sposób.

Jeśli układ jest jednak dostatecznie złożony (o liczbie cząstek rzędu liczby Avogadro $\sim 10^{23}$), czyli makroskopowy (w każdym molu substancji, czyli typowo w kilkudziesięciu gramach [co jest makroskopową ilością] znajduje się liczba Avogadro atomów lub cząsteczek) i dodatkowo otwarty (tzn. oddziałujący z otoczeniem), to jego ewolucja jest termodynamiczna (taki układ silnie reaguje na drobne zmiany warunków początkowych i zapomina o wyjściowych warunkach początkowych i pojawia się w różnych stanach zgodnie z regułami prawdopodobieństwa) i przejawia się klasycznie w postaci makroskopowych zachowań. Termodynamiczna ewolucja takich układów jest ponownie unitarna (zachowuje informację, tym razem klasyczną — jest izoentropowa [28, 18, 19, 20, 21, 143],

ale tylko dla procesów odwracalnych; procesy rzeczywiste dla makroskopowych obiektów są nieodwracalne, tj. odpowiadają wzrostowi entropii, czyli przebiegają w kierunku swoich bardziej prawdopodobnych stanów, np. szklanka gorącej wody wystygnie po pewnym czasie, a nie samoczynnie się nagrzeje).

Główne cechy informacji kwantowej:

- informacja kwantowa, to informacja zawarta w fizycznym nośniku kwantowym [stan kwantowy czysty lub mieszany],
- informacja kwantowa nie ma interpretacji klasycznej,
- pomiar układu kwantowego jest niszczący i niepowtarzalny; dostarcza tylko częściowej informacji klasycznej o niedostępnej w ogólności informacji kwantowej,
- modelem matematycznym nośnika kwantowego informacji jest funkcja falowa w przypadku układu zamkniętego [stan czysty], lub macierz gęstości dla układu oddziałującego z otoczeniem [stan mieszany],
- układ kwantowy (informacja kwantowa) wykonuje deterministyczną ewolucję unitarną, jeśli jest zamknięty; pomiar lub wpływ otoczenia (dekoherencja) zaburzają tę ewolucję.

A.3 Informacja kwantowa i jej opis

A.3.1 Pomiar klasyczny i kwantowy

W celu uzyskania informacji należy wykonać pomiar jej nośnika. W przypadku klasycznym, gdy nośnikiem informacji jest makroskopowa charakterystyka fizyczna układu, pomiar tej wielkości nie zmienia jej i jest powtarzalny. W przypadku układu kwantowego pomiar jest niszczący, niepowtarzalny. W ten sposób sam pomiar wyróżnia obserwatora, który wykonuje ten pomiar. W klasycznej fizyce rola obserwatora nie była wyróżniona i można było wprowadzić abstrakcyjne pojęcie zmiennej losowej odpowiadającej wynikom powtarzanego pomiaru. W kwantowym przypadku nie jest to możliwe.

Zakładając, że obserwatorem jest człowiek, to uzyskana informacja w wyniku pomiaru układu — nośnika informacji — musi być wyrażona przez liczbową charakterystykę i to w sposób możliwy do rozróżnienia przez zmysły człowieka (klasyczne). Ten warunek powoduje, że różne (rozdzielalne dla człowieka) wyniki pomiarów wymagają zróżnicowania makroskopowej liczby stopni swobody ($\sim 10^{23}$) w przyrządzie pomiarowym dokonującym pomiaru nawet na małym układzie kwantowym. Pomiar następuje w wyniku oddziaływania przyrządu pomiarowego z układem. W wyniku tego oddziaływania następuje kwantowe splątanie.

tanie układu mierzonego i przyrządu, co jest ogólną cechą oddziaływania w mechanice kwantowej i będzie to skrótowo opisane w kolejnych podrozdziałach.

A.3.2 Pomiar w mechanice kwantowej

Wielkościom mierzalnym w mechanice kwantowej przyporządkowane są operatory hermitowskie. Wybór takich właśnie operatorów jako obserwabli wiąże się z rzeczywistym charakterem ich wartości własnych, które mogą być interpretowane jako wyniki pomiarów. Operator hermitowski, to taki operator, który spełnia równość,

$$\hat{A}^+ = \hat{A}, \quad (\text{A.4})$$

gdzie, znak $^+$ oznacza sprzężenie hermitowskie (w macierzowej reprezentacji operatorów oznacza ono sprzężenie zespolone i transpozycję macierzy). W ogólności sprzężenie hermitowskie definiowane jest przy pomocy iloczynu skalarnego w przestrzeni Hilberta,

$$(\hat{A}\Psi, \Phi) = (\Psi, \hat{A}^+\Phi). \quad (\text{A.5})$$

Przestrzeń Hilberta to przestrzeń z metryką (czyli odległością) zadaną przez iloczyn skalarny $[\rho(\Psi, \Phi) = (\Psi - \Phi, \Psi - \Phi)]$ i zupełną w tej normie (tzn., że wszystkie ciągi Cauchego są zbieżne – jest to definicja przestrzeni zupełnej, czyli przestrzeni Banacha). Funkcje falowe w mechanice kwantowej, to właśnie funkcje z przestrzeni Hilberta, gdzie iloczyn skalarny pozwala na wprowadzanie ortonormalnych baz (ortogonalność wiąże się z zerowaniem się iloczynu skalarnego). Istnieje bardzo dużo różnych przestrzeni Hilberta – zwykle wielowymiarowe przestrzenie liniowe też są przestrzeniami Hilberta. Wyjątkowo przydatną w mechanice kwantowej przestrzenią Hilberta jest nieskończenie wielo-wymiarowa przestrzeń funkcyjna zespolonych funkcji całkowalnych z kwadratem i z iloczynem skalarnym zadanym przez całkę,

$$(\Psi, \Phi) = \int dr \Psi^*(r)\Phi(r), \quad (\text{A.6})$$

przestrzeń ta nazywana jest L^2 .

Wartości własne danego operatora hermitowskiego wyznaczają go jednoznacznie poprzez tzw. przedstawienie spektralne:

$$\hat{A} = \sum_n a_n \hat{P}_n, \quad (\text{A.7})$$

gdzie a_n jest n -tą rzeczywistą wartością własną operatora \hat{A} , natomiast \hat{P}_n jest operatorem rzutowania na podprzestrzeń własną odpowiadającą n -tej wartości własnej. Operator rzutowania jest hermitowski i nilpotentny,

$$\hat{P}_n^+ = \hat{P}_n, \quad (\text{A.8})$$

$$\hat{P}_n \hat{P}_m = \delta_{nm} \hat{P}_n. \quad (\text{A.9})$$

Pomiar von Neumanna

Zgodnie z postulatem von Neumanna, w mechanice kwantowej przyjmujemy, że w wyniku pomiaru wielkości A (której operator ma spektralne przedstawienie (A.7)) dokonanego na stanie $|\Psi\rangle$ uzyskuje się wynik a_n (jedną z wartości własnych operatora wielkości A) z prawdopodobieństwem p_n ,

$$p_n = \|\hat{P}_n|\Psi\rangle\|^2 = \langle\Psi|\hat{P}_n^+\hat{P}_n|\Psi\rangle = \langle\Psi|\hat{P}_n|\Psi\rangle, \quad (\text{A.10})$$

natomiast funkcja falowa $|\Psi\rangle$ redukuje się (*kolapsuje*) do funkcji (jest to tzw. kolaps von Neumanna):

$$\frac{\hat{P}_n|\Psi\rangle}{\langle\Psi|\hat{P}_n|\Psi\rangle^{1/2}}. \quad (\text{A.11})$$

Można to inaczej zapisać – jeśli mierzona funkcja falowa $|\Psi\rangle$ w bazie ON utworzonej przez hermitowski operator wielkości mierzonej A , ma rozkład,

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= \sum_i c_i |\Phi\rangle_i, \\ \hat{A}|\Phi\rangle_i &= a_i |\Phi\rangle_i, \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

to w wyniku pomiaru przypadkowo otrzymujemy którąś z wartości własnych operatora mierzonej wielkości, np. a_j , natomiast mierzona funkcja falowa zmienia się w funkcję własną odpowiadającą tej wartości własnej, $|\Psi\rangle \rightarrow |\Phi\rangle_j$.

Wybór operatora rzutu jest zupełnie przypadkowy, określone jest tylko prawdopodobieństwo tego wyboru (A.10). To prawdopodobieństwo wynosi $|c_j|^2$ (pamiętamy, że $\sum_i |c_i|^2 = 1$, jak dla rozkładu w każdej bazie ON, zatem i dla rozkładu (A.12)).

A.3.3 Równanie Schrödingera – ewolucja unitarna

Stan kwantowy $|\Psi\rangle$ układu zamkniętego zmienia się w czasie zgodnie z równaniem Schrödingera,

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = \hat{H}|\Psi\rangle, \quad (\text{A.13})$$

co zapisać można w postaci unitarnej ewolucji,

$$\begin{aligned} |\Psi(t)\rangle &= e^{-i\hat{H}t/\hbar} |\Psi(0)\rangle, \\ \hat{U} &= e^{-i\hat{H}t/\hbar}, \quad \hat{U}^+\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^+ = 1 \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

(jeśli hamiltonian nie zależał jawnie od czasu)¹.

Unitarna ewolucja kwantowa jest procesem deterministycznym, tj. odbywa się po jednoznacznej trajektorii w przestrzeni Hilberta (jednoznaczność ta wynika z jednoznaczności rozwiązania różniczkowego równania, jakim jest równanie Schrödingera).

¹dla hamiltonianu zależnego od czasu, $|\Psi(t+dt)\rangle = (1 + \frac{dt}{i\hbar}\hat{H})|\Psi(t)\rangle = \hat{U}|\Psi(t)\rangle$, $\hat{U}^+\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^+ = 1$, z dokładnością do liniowego rzędu względem dt

Jeśli obserwator chce dowiedzieć się czegokolwiek o stanie tego układu, musi dokonać pomiaru jakiejś wielkości, ale wtedy następuje losowy kolaps (redukcja) funkcji falowej do losowo wybranego wektora własnego operatora hermitowskiego wielkości mierzonej (lub ogólniej, podprzestrzeni własnej) zgodnie z rzutowaniem von Neumanna. Kolaps ten gubi nieodwracalnie i zupełnie losowo informację kwantową – po pomiarze układ jest w którymś ze stanów własnych operatora mierzonej wielkości, zupełnie niezwiązanym z mierzonym stanem (wyjątek stanowi tu sytuacja, kiedy mierzony stan jest akurat którymś stanem własnym dla operatora mierzonej wielkości, wtedy po pomiarze pozostanie w tym stanie). Rzutowania von Neumanna jest przypadkowe. Określone jest wyłącznie prawdopodobieństwo "kierunku rzutu". Jest ono określone dla danego stanu w danej chwili przez p_n albo przez $|c_i|^2$ w zapisie (A.12)). Przypadkowość wyboru kierunku rzutowania von Neumanna (czyli wyboru j w zapisie (A.12)) jest niedeterministycznym elementem kwantowej ewolucji. Należy tu podkreślić jednak, że w momencie pomiaru układ nie jest już zamknięty (i dlatego nie odbywa wtedy unitarnej, deterministycznej ewolucji). Kwantowy pomiar oznacza wejście w oddziaływanie z przyrządem, co powoduje, że sam układ nie jest w czasie pomiaru zamknięty (odizolowany od otoczenia). Pomiar kwantowy (rzutowanie von Neumanna) silnie i w nieodwracalny (niedeterministyczny) sposób zaburza stan mierzonego układu, zupełnie inaczej niż w przypadku pomiaru klasycznego, który nie zaburzał mierzonego układu.

Fizycznie pomiar kwantowy polega na oddziaływaniu mierzonego układu z przyrządem pomiarowym i oddziaływania tego nie można uczynić dowolnie małym (w pomiarach wielkości klasycznych, czyli makroskopowych, oddziaływanie w czasie pomiaru można było zaniedbać, w kwantowym przypadku – nie).

W wyniku pomiaru kwantowego (rzutowania von Neumanna) następuje przerwanie unitarnej ewolucji układu kwantowego. Po wykonaniu pomiaru i po wycofaniu przyrządu, układ ponownie podejmuje swoją unitarną ewolucję. Jednak dalszą ewolucję podejmuje już z innego stanu początkowego, a mianowicie rozpoczyna dalszą ewolucję ze stanu w jakim znalazł się w wyniku pomiaru (a ten był wybrany zupełnie przypadkowo przez rzutowanie von Neumanna). Informacja kwantowa, w sensie funkcji falowej układu przed pomiarem, została zatem stracona (w większości, poza jedną liczbą – wynikiem pomiaru) w wyniku pomiaru (w wyniku pomiaru układ "zapomina" o poprzednim warunku początkowym i dostosowuje się do losowo wybranego przez rzutowanie von Neumanna nowego warunku początkowego).

A.3.4 Macierz gęstości — stan informatyczny układu (qbitu)

Jeśli układ A jest w tzw. czystym stanie kwantowym (dotyczy to układu zamkniętego, nieoddziałującego z otoczeniem), to opis przy pomocy funkcji falowej

$|\Psi\rangle$ odzwierciedla pełną informację kwantową zawartą w tym stanie. Ta funkcja falowa utożsamiana jest wtedy z informacją kwantową zawartą w tym stanie.

W przypadku kiedy jednak układ oddziałuje z innym układem (tak jest w wyniku nieusuwalnego w istocie oddziaływania z otoczeniem, czyli opis układu zamkniętego jest idealizacją, lub co najwyżej pewnym przybliżeniem, jeśli oddziaływanie z otoczeniem jest słabe), to opis informacji kwantowej należy uogólnić. Wprowadza się tzw. macierz gęstości opisującą ogólnie informację kwantową, zarówno dla wyidealizowanego układu odosobnionego, jak i układu oddziałującego z otoczeniem.

Macierz gęstości układu w stanie czystym

Macierz gęstości wprowadzić można dla stanu czystego (układu odosobnionego) jako operator rzutowania na ten stan [28, 18, 144]:

$$\hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi|, \quad \hat{\rho} = \sum_{i,j} c_i^* c_j |j\rangle\langle i|, \quad |\Psi\rangle = \sum_i c_i |i\rangle, \quad (\text{A.15})$$

$\{|i\rangle\}$ jest bazą ON w przestrzeni Hilberta.

Wtedy dla dowolnej obserwabli M (reprezentowanej przez operator hermitowski \hat{M}), jej wartość oczekiwana wyraża się jako:

$$\langle \hat{M} \rangle = \langle \Psi | \hat{M} | \Psi \rangle = \text{Tr}(\hat{\rho} \hat{M}), \quad (\text{A.16})$$

gdzie $\text{Tr}... = \sum_i \langle i | \dots | i \rangle$, to ślad w danej bazie przestrzeni Hilberta; w zapisie stanu czystego przy pomocy macierzy gęstości, informacja o stanie $|\Psi\rangle$ została przełożona w ekwiwalentny [zachowując wartości oczekiwane wszystkich obserwabli] sposób do operatora [rzutowania] macierzy gęstości, $|\Psi\rangle\langle\Psi|$, a średnia $\langle \Psi | \hat{M} | \Psi \rangle = \int \Psi^* \hat{M} \Psi$ wyrażona została przez ślad z iloczynu operatorów $\hat{\rho} \hat{M}$.

Iloczyn tensorowy – splątanie kwantowe

Jeśli mamy dwa układy A i B i każdy z nich z osobna miał funkcje falowe z przestrzeni Hilberta \mathcal{H}_A i \mathcal{H}_B , odpowiednio, to w przypadku, kiedy te układy nie oddziałują, to wspólna funkcja falowa całego układu AB jest iloczynem funkcji falowych układu A i układu B, tj.,

$$|\Psi_{AB}\rangle = |\Psi_A\rangle |\Psi_B\rangle, \quad (\text{A.17})$$

funkcje obu układów mają swoje niezależne argumenty (np. położenia dla cząstki A i cząstki B), a funkcja całego układu AB jest funkcją od obu tych argumentów.

Łatwo sprawdzić, że rzeczywiście taka funkcja falowa spełnia równanie Schrödingera, kiedy hamiltonian układu AB jest sumą hamiltonianów układów A i B, tj.,

$$\hat{H}_{AB} = \hat{H}_A + \hat{H}_B, \quad (\text{A.18})$$

czyli, kiedy układy A i B są niezależne i nieoddziałujące.

Jeśli jednak układy A i B oddziałują (nie są niezależne), to hamiltonian układu AB wyraża się jako:

$$\hat{H}_{AB} = \hat{H}_A + \hat{H}_B + \hat{V}_{AB}, \quad (\text{A.19})$$

gdzie, \hat{V}_{AB} jest operatorem opisującym oddziaływanie między układami A i B. Wtedy dowolny stan układu AB nie jest już zwykłym iloczynem stanów układu A i układu B. Należy skonstruować przestrzeń Hilberta dla układu AB, kiedy układy oddziałują. Można przypuszczać, że należy wziąć wszystkie iloczyny wszystkich stanów układu A i układu B. Rzecz w tym, że taki prosty iloczyn \mathcal{H}_A i \mathcal{H}_B nie jest przestrzenią liniową, a przestrzeń Hilberta musi być przestrzenią liniową. Dlatego oprócz zwykłych iloczynów należy wziąć jeszcze wszystkie ich liniowe kombinacje. W ten sposób utworzona przestrzeń nazywa się iloczynem tensorowym przestrzeni wyjściowych, i oznacza się ją jako,

$$\mathcal{H}_{AB} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B. \quad (\text{A.20})$$

W ten sposób utworzona została przestrzeń Hilberta dla układu dwóch podukładów i każda funkcja falowa całego układu AB należy do $\mathcal{H}_{AB} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$. Baza przestrzeni $\mathcal{H}_{AB} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ wyraża się poprzez proste iloczyny baz \mathcal{H}_A i \mathcal{H}_B , bo dowolny element z iloczynu tensorowego jest liniową kombinacją takich prostych iloczynów. Czyli baza iloczynu tensorowego złożona jest z funkcji:

$$|ij\rangle_{AB} = |i\rangle_A \otimes |j\rangle_B, \quad (\text{A.21})$$

(w powyższym wyrażeniu \otimes oznacza zwykle mnożenie, a symbol podkreśla związek z konstrukcją iloczynu tensorowego przestrzeni), w przypadku gdy wymiary przestrzeni układów A i B były skończone i równe n i m , to wymiar iloczynu tensorowego tych przestrzeni jest nm .

Dowolna funkcja falowa układu złożonego z dwóch oddziałujących podukładów ma zatem postać (rozłożenie w bazie iloczynu tensorowego):

$$|\Psi\rangle_{AB} = \sum_{i,j} c_{ij} |i\rangle_A \otimes |j\rangle_B. \quad (\text{A.22})$$

Na przykład może to być stan,

$$|\Psi\rangle_{AB} = 1/\sqrt{2} |1\rangle_A \otimes |1\rangle_B + 1/\sqrt{2} |2\rangle_A \otimes |2\rangle_B, \quad (\text{A.23})$$

gdzie widać, że ani układ A ani układ B nie ma swojej funkcji falowej – obydwa układy są w części w stanie $|1\rangle$, a w części w stanie $|2\rangle$ (nie można powyższej funkcji falowej układu AB przedstawić w postaci prostego iloczynu dwóch funkcji podukładów, nie można tu żadnej funkcji podukładu wyciągnąć przed nawias). Mamy zatem do czynienia jakby ze zmieszaniem stanów poszczególnych

podukładów – dlatego stany podukładów oddziałujących ze sobą nie są stanami czystymi i nazywane są stanami mieszanymi. Mimo, że podukłady oddziałujące między sobą są najczęściej w stanach mieszanych a nie czystych, to cały układ jest zawsze w stanie czystym. Ten stan czysty całego układu obejmuje jednak mieszanie podukładów i kiedy jest ono nieseparowalne (tzn. nie jest to prosty iloczyn funkcji podukładów, ale jest nieseparowalnym elementem iloczynu tensorowego obu przestrzeni Hilberta podukładów), to mówimy wtedy o splątaniu kwantowym podukładów. Podukłady splątane są w stanach mieszanych i poprzez strukturę iloczynu tensorowego są powiązane ze sobą wzajemnie. Ten prosty algebraiczny fakt wynikający z elementarnej struktury iloczynu tensorowego, w fizycznej interpretacji przejawia się w pozornie tajemniczym kwantowym związku podukładów na odległość (układ A, np. cząstka A może mieć odległe współrzędne/położenie w stosunku do układu B, np. cząstki B). Splątanie kwantowe jest, jak widać, prostą konsekwencją oddziaływania i wobec powszechności oddziaływania na świecie, jest też powszechnym zjawiskiem na kwantowym poziomie opisu materii.

Tajemniczy pozornie związek na odległość wynikający ze splątania kwantowego nie jest intuicyjnie wytłumaczalny – jest on naturalną i prostą konsekwencją liniowości przestrzeni Hilberta i w tym iloczynu tensorowego. Ale liniowość i przestrzenie Hilberta nie są w żadnym stopniu elementem intuicyjnym, ponieważ intuicja to przejaw klasycznej organizacji świadomości, w której nie mieści się mechanika kwantowa z przestrzeniami Hilberta. Dlatego od początku traktowano splątanie kwantowe jako paradoks i nawet Albert Einstein, Borys Podolski (Polak z pochodzenia) i Nathan Rosen sformułowali ten paradoks w postaci tzw. paradoksu EPR. Eksperymentalne bezpośrednie potwierdzenie splątania kwantowego przeprowadzono dopiero w latach 80-tych XX wieku (eksperymenty Alaina Aspecta [145]).

Macierz gęstości układu w stanie mieszanym

Macierz gęstości można wprowadzić także dla układu oddziałującego z innym układem (np. z otoczeniem). Jeśli układ A oddziałuje z układem B i razem tworzą zamknięty układ AB, który jako całość jest już w stanie czystym określonym w iloczynie tensorowym przestrzeni Hilberta obu układów:

$$|\Psi\rangle_{AB} \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B, \quad (\text{A.24})$$

to wtedy, zgodnie z poprzednim schematem, macierz gęstości układu A+B dla tego stanu jest równa:

$$\hat{\rho}_{AB} = |\Psi\rangle_{AB} \langle\Psi|_{AB}. \quad (\text{A.25})$$

Jeśli w przestrzeniach Hilberta \mathcal{H}_A , \mathcal{H}_B , wybieramy bazy ON (ortonormalne) $\{|i\rangle_A\}$, $\{|r\rangle_B\}$, to wtedy $|\Psi\rangle_{AB} = \sum_{i,r} a_{ir} |i\rangle_A \otimes |r\rangle_B$, zgodnie z definicją iloczynu tensorowego obu przestrzeni. Z macierzy gęstości dla pełnego układu AB

(będącego w stanie czystym) można wziąć teraz ślad po układzie B. Otrzymamy wtedy macierz gęstości dla układu A oddziałującego z B (układ A nie znajduje się wtedy w stanie czystym, ale w ogólności, w stanie mieszanym). Zatem macierz gęstości układu A w stanie mieszanym wyrazi się wzorem:

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_A &= Tr_B(\hat{\rho}_{AB}) = \sum_r B \langle r | \hat{\rho}_{AB} | r \rangle_B \\ &= \sum_{r,i,j,p,s} a_{ip} a_{js}^* B \langle r | p \rangle_B B \langle s | r \rangle_B | i \rangle_A \langle j | \\ &= \sum_{i,j,r} a_{ir} a_{jr}^* | i \rangle_A \langle j |.\end{aligned}\quad (\text{A.26})$$

W przedstawionych powyżej formułach (A.15) i (A.26) różnica polega tu na dodatkowym indeksie r i sumowaniu po nim w przypadku stanu mieszanego, co powoduje, że w przypadku stanu mieszanego macierz gęstości nie jest już operatorem rzutowania. W każdym przypadku jednak macierz gęstości posiada trzy własności,

- $\hat{\rho}^+ = \hat{\rho}$ – jest operatorem hermitowskim,
- $\forall |\Psi\rangle \langle \Psi | \hat{\rho} | \Psi \rangle \geq 0$ – jest nieujemnie określona,
- $Tr(\hat{\rho}) = 1$.

Z własności hermitowskości macierzy gęstości wynika, że operator ten można zdiagonalizować przez odpowiedni wybór bazy w przestrzeni Hilberta (operatory hermitowskie zawsze można zdiagonalizować – na diagonalu stoją wtedy wartości własne [rzeczywiste dla operatorów hermitowskich], a funkcje własne tworzą bazę ON w przestrzeni Hilberta). Wartości własne tego operatora są rzeczywiste (jak każdego operatora hermitowskiego), oraz muszą być nieujemne (co wynika z drugiej własności). Ślad tego operatora jest równy 1 i nie zależy od wyboru bazy (ogólną własnością śladu jest jego niezależność od bazy, w której go obliczamy), zatem suma wartości własnych jest równa 1 (ślad to suma elementów na diagonalu; ślad macierzy niediagonalnej to także suma elementów z diagonalu i nie zmienia się kiedy postać macierzy się zmienia w wyniku zmiany bazy do innej niediagonalnej, lub diagonalnej postaci).

Oznacza to, że w przestrzeni Hilberta układu A, \mathcal{H}_A , istnieje taka baza $\{|i\rangle_A\}$, że (postać diagonalna operatora hermitowskiego),

$$\hat{\rho}_A = \sum_i p_i |i\rangle_A \langle i|, \quad (\text{A.27})$$

gdzie p_i są tymi wartościami własnymi, $0 \leq p_i \leq 1$, oraz $\sum_i p_i = 1$.

Gdy układ jest w stanie czystym, to jego macierz gęstości ma postać $\hat{\rho}_A = |\Psi\rangle_A \langle \Psi|$, tylko z jedną wartością własną równą 1. Wtedy (zgodnie z poprzednim opisem) macierz gęstości jest operatorem rzutowania na ten jeden stan

czysty układu A. W ogólnym przypadku, macierz gęstości jest sumą operatorów rzutowania na ortogonalne wektory własne (ta suma nie jest już operatorem rzutowania)².

W przypadku, gdy macierz gęstości nie jest operatorem rzutowania, tzn. gdy układ A nie jest w stanie czystym, mówimy, że jest on w stanie mieszanym. Można powiedzieć, że zgodnie ze wzorem (A.27) układ A z prawdopodobieństwem p_i jest w stanie $|i\rangle$ (nie jest zatem w żadnym ze stanów czystych, ale w ich mieszaninie – stąd nazwa *stan mieszany*). Mimo że układ A nie jest w stanie czystym, to jednak cały układ AB jest w stanie czystym (zgodnie z założeniem). Należy podkreślić, że zmieszanie wynikało z oddziaływania układów A i B i oznacza ich kwantową korelację. Korelację tę nazywamy kwantowym splątaniem [28, 18, 19, 20, 21].

W szczególności rozpatrywać można najprostszy układ kwantowy — *qubit*, którego stan jest wektorem z dwuwymiarowej przestrzeni Hilberta (jest to najmniejsza możliwa przestrzeń Hilberta z bazą ON). Stan mieszany qubitów i jego stan czysty są zatem formami elementarnej informacji kwantowej, której nośnikiem jest ten qubit.

A.3.5 Nierówności Bella

Splątanie kwantowe budziło wątpliwości odnośnie lokalności i realności mechaniki kwantowej od samego początku jej sformułowania. Postulowano modele ukrytych zmiennych, które stałyby za dziwną realizacją mechaniki kwantowej i pozwoliłyby ominąć jej nieklasyczne aspekty. Takie ujęcie, w kategoriach klasycznego modelu z ukrytymi zmiennymi, przy założeniu lokalności i realizmu, prowadzi do standardowych probabilistycznych związków na funkcje korelacyjne, wyrażanych m.in. w postaci tzw. nierówności Bella [146]. Intuicyjnym przykładem nierówności Bella jest pewność, że przy rzucaniu trzema monetami, dwie spośród nich będą miały tę samą stronę na wierzchu (ponieważ strony są tylko dwie). W kwantowym przypadku, przy obecności stanów splątanych okazuje się, że nierówności Bella mogą być naruszone, co uważa się za potwierdzenie, że mechanika kwantowa nie spełnia warunków lokalnego realizmu, nie jest więc teorią z ukrytymi zmiennymi. Naruszenie standardowych nierówności probabilistycznych na funkcje korelacyjne wynika w istocie z koncepcji pomiaru kwantowego, zwłaszcza w przypadku stanów splątanych. Pomiary potrzebne do ustalenia korelacji w klasycznym sensie probabilistycznym mogą nie być wykonalne w mechanice kwantowej z uwagi na nieodwracalny i niszczący charakter rzutowania von Neumanna, co prowadzi właśnie do naruszenia klasycznych ograniczeń. Ważnym osiągnięciem było po-

²operator rzutowania \hat{P} musi spełniać warunek nilpotentności, tj. $\hat{P}^2 = \hat{P}$, a z tego wynika, że $Tr(\hat{P}^2) = Tr(\hat{P})$; jednak dla macierzy gęstości stanu mieszanego mamy $\hat{\rho} = \sum p_i |i\rangle\langle i|$, $Tr(\hat{\rho}^2) = \sum_i p_i^2 < \sum_i p_i = Tr(\hat{\rho})$, czyli dla macierzy gęstości dla stanu mieszanego $\hat{\rho}^2 \neq \hat{\rho}$, zatem nie jest to operator rzutowania

twierdzenie eksperymentalne naruszenia nierówności Bella w splątanych stanach, co po raz pierwszy uzyskano w 1982 roku (eksperymenty A. Aspecta [145]).

A.3.6 Reprezentacja Schmidta i stany splątane

Niezwykle ciekawą konsekwencją splątania kwantowego jest tzw. reprezentacja Schmidta, która pozwala w bardzo prosty sposób zauważyć, że splątanie kwantowe jest symetryczne, tzn. że dwa splątane układy są ze sobą splątane wzajemnie w takim samym stopniu. Informatycznie oznacza to, że oba splątane układy wpięły w siebie wzajemnie tę samą informację w ilości zależnej od miary splątania, jednak zawsze symetrycznie. Przypomina to III zasadę dynamiki o symetrii "akcji i reakcji" – można tu domniemywać, że to kwantowe własności splątania w wyniku oddziaływania leżą u podstaw klasycznego przejawu symetryczności oddziaływania wyrażonego III zasadą dynamiki Newtona.

Z własności hermitowskości dowolnej macierzy gęstości wynika, że możemy zawsze dla układu A, będącego częścią układu AB, wybrać bazę ON w przestrzeni Hilberta \mathcal{H}_A taką, w której macierz gęstości układu A jest diagonalna, tj.

$$\hat{\rho}_A = \sum_i p_i |i\rangle_A \langle i|. \quad (\text{A.28})$$

Funkcję falową stanu czystego układu AB, można zapisać używając tej bazy w przestrzeni Hilberta układu A, tj.

$$|\psi\rangle_{AB} = \sum_{i,r} a_{ir} |i\rangle_A \otimes |r\rangle_B = \sum_i |i\rangle_A \otimes \left[\sum_r a_{ir} |r\rangle_B \right] = \sum_i |i\rangle_A \otimes |\tilde{i}\rangle_B. \quad (\text{A.29})$$

Wektory $|\tilde{i}\rangle_B$ nie tworzą bazy ON w \mathcal{H}_B , ale są ortogonalne (nie są unormowane), gdyż:

$$\begin{aligned} \text{Tr}_B(|\psi\rangle_{AB} \langle \psi|) &= \sum_r \langle r| \sum_i |i\rangle_A \otimes |\tilde{i}\rangle_B \sum_j \langle A| \otimes \langle B| j| |r\rangle_B \\ &= \sum_{i,j} \langle B| j| |\tilde{i}\rangle_B \langle i| \langle A| = \sum_i p_i |i\rangle_A \langle i| \end{aligned} \quad (\text{A.30})$$

i stąd: $\langle B| j| |\tilde{i}\rangle_B = \delta_{ij} p_i$. Wektory $|\tilde{i}\rangle_B$ można unormować:

$$|i\rangle'_B = \frac{1}{\sqrt{p_i}} |\tilde{i}\rangle_B, \quad (\text{A.31})$$

co ważne, tylko dla niezerowych p_i (liczba tych wektorów jest równa liczbie niezerowych wartości własnych macierzy gęstości $\hat{\rho}_A = \sum_i p_i |i\rangle_A \langle i|$). Wektory te można następnie uzupełnić do pełnej bazy ON w \mathcal{H}_B .

Korzystając z wektorów $|i\rangle'_B$, funkcję falową stanu czystego układu AB można zatem przedstawić w postaci, (na podstawie (A.29)):

$$|\psi\rangle_{AB} = \sum_i \sqrt{p_i} |i\rangle_A \otimes |i\rangle'_B \quad (\text{A.32})$$

i jest to reprezentacja stanu splątanego (obie bazy są ON w przestrzeniach dla układów A i B). Należy podkreślić, że bazy te wybrane są dla konkretnego stanu splątanego całego układu (i nie są jednakowe dla różnych stanów splątanych układu AB).

Powyższe przedstawienie stanu czystego (w ogólności splątanego) układu złożonego z dwóch podukładów nazywane jest reprezentacją Schmidta. Ta reprezentacja wskazuje, że informacja kwantowa dwóch oddziałujących układów kwantowych wczytywana jest w obydwu układy *symetrycznie*. Obie macierze gęstości stanów mieszanych podukładów mają identyczne niezerowe wartości własne (mogą mieć różny wymiar i różnić się ilością zer na diagonalu – ale informacja kwantowa zawarta jest w tych niezerowych wartościach własnych i jest identyczna dla obu macierzy). Fakt ten przypomina o symetryczności oddziaływań klasycznych, wyrażonej przez III zasadę dynamiki Newtona ("akcji i reakcji") — wydaje się zatem prawdopodobne, że reprezentacja Schmidta leży u podstaw zasady klasycznej symetryczności "akcji i reakcji".

Dla sprawdzenia: korzystając z tej opisanej wyżej reprezentacji (tj. ze wzoru (A.32)) możemy zapisać macierz gęstości dla stanu mieszanego układu A w postaci diagonalnej

$$\hat{\rho}_A = Tr_B(|\Psi\rangle_{AB} \langle\Psi|) = \sum_i p_i |i\rangle_A \langle i|, \quad (\text{A.33})$$

ale i równocześnie, także w diagonalnej postaci, macierz gęstości dla układu B, tzn.

$$\hat{\rho}_B = Tr_A(|\Psi\rangle_{AB} \langle\Psi|) = \sum_i p_i |i\rangle'_B \langle i'|. \quad (\text{A.34})$$

W tej reprezentacji (tj. przy takim wyborze baz w obu przestrzeniach, jak w reprezentacji Schmidta) obie macierze gęstości są diagonalne i co istotne, mają takie same wartości własne (jest ich tyle samo, chociaż wymiary \mathcal{H}_A i \mathcal{H}_B mogą być różne, wtedy obie macierze gęstości różnią się stopniem degeneracji wartości własnej równej zeru).

Dalsze wnioski wynikające z powyższej reprezentacji można odnieść do sposobu i jednoznaczności odtwarzania funkcji stanu splątanego na podstawie obu macierzy gęstości $\hat{\rho}_A$ i $\hat{\rho}_B$ [28, 18, 19, 20, 21].

A.3.7 Liczba Schmidta

Liczbą Schmidta nazywamy liczbę niezerowych (wspólnych) wartości własnych macierzy gęstości $\hat{\rho}_A$ i $\hat{\rho}_B$. Jeśli liczba Schmidta jest większa od 1, to stan $|\psi\rangle_{AB}$ nazywamy stanem splątany (wobec jednakowych wartości własnych obu układów możemy powiedzieć, że oba układy są splątane ze sobą w takim samym stopniu). W przeciwnym przypadku (kiedy liczba Schmidta jest równa 1) jest to

stan niesplątany, czyli separowalny (taki stan można przedstawić w postaci pojedynczego iloczynu dwóch stanów czystych obu układów, a nie w postaci liniowej kombinacji takich iloczynów, jak ma to miejsce dla stanów splątanych).

Jak można dostrzec z powyższych rozważań, nie można zwiększyć liczby Schmidta przez lokalne operacje tylko na jednym z układów. Splątanie obu układów jest wynikiem oddziaływania, czyli symetrycznej wymiany informacji kwantowej między dwoma układami. Ich równoczesny udział w tym procesie jest konieczny. Bardzo interesującym faktem jest, że liczbę Schmidta można jednak zmniejszać przez operacje lokalne na jednym z podukładów – tego typu sytuacja będzie przedstawiona przy okazji teleportacji kwantowej. Możliwość zmniejszania liczby Schmidta przez działania tylko na jednym z układów (np. tylko na jednym z pary splątanych qubitów) jest ważnym aspektem informatycznym – pozwala pozbywać się informacji kwantowej nabytej przez układ (qubit) w czasie poprzednich oddziaływań z innymi układami. W przeciwnym wypadku informacja (w wyniku kolejnych oddziaływań) musiałaby być gromadzona na pojedynczych układach, co wydaje się nieprawdopodobne wobec mnogości cząstek i oddziaływań w mikroświecie.

Należy tu podkreślić, że splątanie kwantowe (czyli wzajemne i symetryczne powiązanie informatyczne dwóch układów) jest zjawiskiem nielokalnym (argumenty przestrzenne funkcji z przestrzeni Hilberta obu splątanych układów mogą być odległe geometrycznie) i powstającym w wyniku oddziaływania. Jest efektem całkowicie kwantowym i nie ma klasycznego odpowiednika – splątanie jest związane z algebrą przestrzeni Hilberta i prostymi własnościami iloczynu tensorowego.

A.3.8 Pomiar w sensie von Neumanna – superwybór Żurka

Najbardziej niejasną kwestią mechaniki kwantowej jest pomiar kwantowego układu wg schematu von Neumanna. Zupełnie nie wiadomo dlaczego wynik pomiaru jest całkowicie przypadkowy i zachodzi dodatkowo jeszcze rzutowanie na przypadkowy stan.

Nasuwa się tu prosta analogia ze zdarzeniami losowymi – np. z rzucaniem monetą. Gdy trzymamy w ręku monetę, to jest ona jakby w stanie kwantowym – nie jest ani z określonym orłem ani reszką. Musimy dokonać pomiaru, w tym przypadku rzucić monetę. W wyniku wyjdzie orzeł lub reszka – nie wiemy z góry co wyjdzie, wiemy tylko, że prawdopodobieństwa są tu $1/2$ – tak samo jak w schemacie von Neumanna. Po rzuceniu, albo orzeł albo reszka musiała jednak wyjść, a moneta leży teraz w stanie odpowiednim, albo z orłem albo z reszką na wierzchu – w ten sposób dokonane zostało rzutowanie von Neumanna na przypadkowy niewiadomy z góry stan.

Schemat pomiaru kwantowego, to w istocie fizyczny schemat prawdopodobieństwa i zdarzeń losowych. Uważa się, że wszystkie zdarzenia losowe organi-

zowane klasycznie są w rzeczywistości pseudolosowe, natomiast rzutowanie von Neumanna jest idealnie losowe. Nie wiadomo, czy jest to prawdą, czy tylko wynika z niewiedzy w jaki sposób zorganizowana jest mechanika kwantowa. Jednakże liczne próby klasycznego wyjaśnienia mechaniki kwantowej i losowości rzutowania von Neumanna nie przyniosły rezultatu. Eksperymentalne natomiast weryfikacje kwantowej mechaniki potwierdzają raczej, że mamy tu do czynienia z idealną kwantową losowością gwarantowaną przez prawa przyrody. Idealna losowość ma podstawowe znaczenie w procedurach kryptograficznych, dlatego też kwantowa losowość von Neumanna gwarantuje bezwarunkowe bezpieczeństwo kwantowo zorganizowanych procedur kryptograficznych.

Próby wytłumaczenia pomiaru von Neumanna podejmowane były od początku konstruowania formalizmu mechaniki kwantowej. Mimo wysiłków nie udaje się jednak ująć losowości zawartej w kolapsie funkcji falowej przy pomocy unitarnej ewolucji. Problem ten nabiera ostatnio coraz większego znaczenia wobec informatycznej interpretacji rzutowania von Neumanna, jako konwersji informacji kwantowej na informację klasyczną.

Pomiar układu kwantowego dokonywany musi być przez przyrząd klasyczny, po to by w sposób klasyczny, makroskopowy odróżnić wynik tego pomiaru. Jest to konieczne po to, by można było tu mówić o zauważalnym wychyleniu makroskopowej wskazówki (albo też może to być np. wyświetlony, zauważalny i odróżnialny obraz na monitorze). W każdym przypadku możliwość makroskopowej identyfikacji wyniku przez klasycznego obserwatora wymaga zaangażowania makroskopowej liczby atomów (stopni swobody), rzędu liczby Avogadro $\sim 10^{23}$, nawet przy pomiarze stanu pojedynczego qubitu. W tym sensie oddziaływanie np. jednym elektronem na inny, nie jest pomiarem, gdyż nie występuje tu konwersja informacji kwantowej na klasyczną.

Interesującą interpretację rzutowania von Neumann podał Wojciech Żurek [obecnie w Los Alamos, USA] [147]. Schemat jego rozumowania jest następujący.

Rozpatrzmy obserwabłą (wielkość mierzona), której hermitowskim operatorem jest \hat{A} i założmy dla prostoty, że operator ten ma tylko dwa wektory własne: $|1\rangle$ i $|2\rangle$, i odpowiadające im dwie wartości własne λ_1 i λ_2 . Te dwie wartości własne są dwoma możliwymi wynikami pomiaru wielkości, której odpowiada operator \hat{A} . Załóżmy też, że nasz stan kwantowy podlegający pomiarowi, to qubit rozpięty na wektorach $|1\rangle$ i $|2\rangle$. Dowolny stan czysty qubitu, to koherentna superpozycja $|\Psi\rangle = x|1\rangle + e^{i\psi}\sqrt{1-x^2}|2\rangle$, $x, \psi \in \mathbb{R}$, $x \in [0, 1]$, $\psi \in [0, 2\pi)$. Zgodnie ze schematem rzutowania von Neumanna, w wyniku pomiaru qubitu w stanie $|\Psi\rangle$ wielkości A , z prawdopodobieństwem x^2 otrzymujemy wynik λ_1 i zmianę stanu $|\Psi\rangle$ w stan $|1\rangle$, oraz z prawdopodobieństwem $1-x^2$ otrzymujemy wynik λ_2 , a stan $|\Psi\rangle$ przechodzi w stan $|2\rangle$.

Dla stanu czystego $|\Psi\rangle$ macierz gęstości ma postać (w zapisie macierzowym):

$$|\Psi\rangle\langle\Psi| = \begin{pmatrix} x^2, & e^{-i\psi}x\sqrt{1-x^2} \\ e^{i\psi}x\sqrt{1-x^2}, & 1-x^2 \end{pmatrix},$$

Macierz ta jest hermitowska i ma ślad 1. Na diagonalu macierzy gęstości stoją prawdopodobieństwa wyników pomiaru wielkości A . Pozadiagonalne elementy zawierają różnicę faz ψ współczynników superpozycji. Wyniki pomiaru wielkości A nie dają żadnej informacji o różnicy faz ψ . Pomiar niszczy tę część informacji (stanu kwantowego) zawartą w różnicy faz współczynników superpozycji. Można to zapisać macierzowo:

$$|\Psi\rangle\langle\Psi| = \begin{pmatrix} x^2, & e^{-i\psi}x\sqrt{1-x^2} \\ e^{i\psi}x\sqrt{1-x^2}, & 1-x^2 \end{pmatrix} \Longrightarrow \begin{pmatrix} x^2, & 0 \\ 0, & 1-x^2 \end{pmatrix},$$

gdzie \Longrightarrow oznacza pomiar. Dostępne pomiarowo są tylko diagonalne elementy – wyrażają one prawdopodobieństwa pojawienia się dwóch różnych wyników pomiaru. W zasadzie można otrzymać o nich informację w wyniku wielokrotnego powtórzenia pomiaru na takim samym układzie (tzn. na układzie w tym samym stanie). W wyniku pomiaru znika informacja o różnicy faz, tzn. następuje zupełna dekoherencja fazowa [zmiana elementów diagonalnych macierzy gęstości nazywana jest dekoherencją amplitudową, a niediagonalnych — dekoherencją fazową]. Zawartość diagonalnych elementów nie ulega zmianie w wyniku pomiaru.

Pojawia się pytanie, jak przebiega znikanie elementów niediagonalnych macierzy gęstości w wyniku pomiaru. Przyrząd pomiarowy dokonujący pomiaru jest układem makroskopowym, o liczbie stopni swobody rzędu liczby Avogadro, gdyż wynik pomiaru ma być czytelny dla obserwatora, który rozumie tylko klasyczną informację. Taka informacja wymaga zmiany stopni swobody w liczbie rzędu liczby Avogadro.

Z drugiej strony pomiar to wpisywanie informacji o stanie $|1\rangle$ lub $|2\rangle$ danego mierzonego układu w przyrząd P i wczytywanie to odbywa się w wyniku oddziaływania układu z przyrządem. Przed pomiarem, kiedy przyrząd P jest oddalony od układu, stan przyrządu opisywała jego funkcja falowa $|\Phi_0\rangle$. Przyrząd P i mierzony układ tworzą razem większy układ, który przed pomiarem jest w stanie czystym $|\Omega_0\rangle = |\Psi\rangle \otimes |\Phi_0\rangle$.

Macierz gęstości układu U można wyrazić jako ślad po stanach przyrządu z macierzy gęstości układu wraz z przyrządem:

$$\begin{aligned} \hat{\rho} &= Tr_P |\Omega_0\rangle\langle\Omega_0| \\ &= \begin{pmatrix} x^2 \langle\Phi_0|\Phi_0\rangle, & x\sqrt{1-x^2}e^{-i\psi} \langle\Phi_0|\Phi_0\rangle \\ x\sqrt{1-x^2}e^{i\psi} \langle\Phi_0|\Phi_0\rangle, & (1-x^2) \langle\Phi_0|\Phi_0\rangle \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (\text{A.35})$$

gdzie całka $\langle\Phi_0|\Phi_0\rangle$ jest wynikiem wzięcia śladu po stanach przyrządu P : $Tr_P \dots = \sum_r \langle r | \dots | r \rangle_P$, gdzie $\{|r\rangle_P\}$ jest bazą w przestrzeni Hilberta

przyrządu ($\sum_r |r\rangle_P \langle r| = 1$ – jest to warunek zupełności bazy, spełniony dla wszystkich baz ON). Zatem $Tr_P(|\Phi\rangle_P \langle \Psi|) = \sum_r \langle r|\Phi\rangle \langle \Psi|r\rangle = \langle \Psi|\sum_r |r\rangle \langle r|\Phi\rangle = \langle \Psi|\Phi\rangle$. Z warunku normowania $\langle \Phi_0|\Phi_0\rangle_P = 1$, zatem rzeczywiście mamy wyjściową macierz gęstości.

Jeśli stan mierzonego układu byłby $|1\rangle$, to z całą pewnością otrzymalibyśmy po pomiarze ten sam stan (w takim przypadku $x = 1$), podobnie gdyby stan układu byłby $|2\rangle$, to po pomiarze stan też pozostałby niezmienny. W pierwszym przypadku stan przyrządu P po pomiarze byłby pewnym stanem z wczytaną informacją o wyniku pomiaru, Φ_1 , a w drugim przypadku Φ_2 . Można zatem napisać

$$|1\rangle \otimes |\Phi_0\rangle \implies |1\rangle \otimes |\Phi_1\rangle, \quad |2\rangle \otimes |\Phi_0\rangle \implies |2\rangle \otimes |\Phi_2\rangle. \quad (\text{A.36})$$

Jeśli pomiaru dokonujemy na superpozycji $|\Psi\rangle = a_1|1\rangle + a_2|2\rangle$, to wtedy pomiar przebiega według schematu:

$$|\Omega_0\rangle = (a_1|1\rangle + a_2|2\rangle) \otimes |\Psi\rangle \implies a_1|1\rangle \otimes |\Phi_1\rangle + a_2|2\rangle \otimes |\Phi_2\rangle = |\Omega_1\rangle. \quad (\text{A.37})$$

Po pomiarze, ani przyrząd, ani układ nie są w stanach czystych, chociaż razem tworzą stan czysty $|\Omega_1\rangle$ całego układu U+P (który jest stanem splątany). W tym splątany stan układ U jest jakby częściowo w stanie $|1\rangle$, a częściowo w stanie $|2\rangle$. Podobnie przyrząd jest częściowo w stanie $|\Phi_1\rangle$, a częściowo w stanie $|\Phi_2\rangle$. Jest to nieseparowalny element iloczynu tensorowego (stan splątany układu i przyrządu).

Macierz gęstości całego układu U+P po pomiarze jest operatorem rzutowania $|\Omega_1\rangle \langle \Omega_1|$. Biorąc ślad po stanach przyrządu znaleźć można postać macierzy gęstości dla układu po pomiarze, czyli:

$$Tr_P(|\Omega_1\rangle \langle \Omega_1|) = \begin{pmatrix} x^2 \langle \Phi_1|\Phi_1\rangle, & x\sqrt{(1-x^2)}e^{-i\psi} \langle \Phi_1|\Phi_2\rangle \\ x\sqrt{(1-x^2)}e^{-i\psi} \langle \Phi_2|\Phi_1\rangle, & (1-x^2) \langle \Phi_2|\Phi_2\rangle \end{pmatrix}. \quad (\text{A.38})$$

O wartości całki $\langle \Phi_1|\Phi_2\rangle$ można wnioskować na podstawie różnicy między obiema funkcjami na makroskopowej liczbie stopni swobody (muszą się różnić na tylu stopniach swobody, ponieważ odpowiadają dwóm rozróżnialnym makroskopowo stanom przyrządu). W. Żurek argumentował [147, 148], że całka ta jest całką wielokrotną, o krotności rzędu liczby Avogadro, i w podobnej ilości przypadków występuje różna zależność funkcyjna obu funkcji, prowadząca do zmniejszenia w stosunku do 1 wartości pojedynczej całki w całce wielokrotnej. Jeśli w tych różnych przypadkach każda całka daje tylko nieznacznie mniejszą od 1 wartość, to cała całka wielokrotna jest praktycznie równa 0 (w wyniku przemnożenia przez siebie ogromnej liczby czynników nawet niewiele tylko mniejszych od jedności).

W ten sposób zrozumieć można znikanie niediagonalnych elementów macierzy gęstości i otrzymujemy macierz gęstości po pomiarze zgodnie ze schematem von Neumanna (następuje zupełna dekoherencja fazowa).

Powyżej przytoczona argumentacja pozwala połączyć znikanie w wyniku pomiaru elementów pozadiagonalnych (czynniki fazowych) w macierzy gęstości z wielką liczbą stopni swobody przyrządu, która zostaje uruchomiona w czasie pomiaru von Neumanna. Stopnie te są uruchamiane w sensie informatycznym. To w nich zapisywana jest informacja o wyniku pomiaru. W różny sposób dla różnych wyników. By różne wyniki mogły być makroskopowo odróżnialne, to każdy wynik musi zostać zapisany w charakterystyczny sposób przy użyciu ogromnej liczby stopni swobody przyrządu.

Zauważamy tu jednak istotną trudność – w jaki sposób informacja zawarta w qubicie (czyli w układzie o zaledwie dwóch stopniach swobody) może uruchomić informacyjnie makroskopową liczbę stopni swobody przyrządu? Obowiązuje reprezentacja Schmidta, która gwarantuje symetrię przekazu informacji w czasie oddziaływania i zatem także w czasie pomiaru. Próbę odpowiedzi na tak postawione pytanie, kluczowe dla zrozumienia sposobu konwersji informacji kwantowej na klasyczną, przedstawiamy poniżej.

Podczas dokonywania pomiaru qubitu według schematu von Neumanna, informacja o stanie qubitu musi być wczytana w przyrząd pomiarowy i to w taki sposób, by uruchomić (zmienić) w nim makroskopową liczbę stopni swobody, po to by można było makroskopowo odróżnić wynik pomiaru.

Tymczasem z reprezentacji Schmidta wynika, że w wyniku oddziaływania qubitu o dwóch stopniach swobody z przyrządem pomiarowym o dużej liczbie stopni swobody, tylko mniejsza z tych liczb określa wzajemną możliwą wymianę informacji w wyniku oddziaływania (splątania). Nie jest możliwe zatem zapisanie informacji o qubicie w więcej niż w dwóch stopniach swobody przyrządu, a to nie pozwoliłoby na zauważenie w makroskopowy sposób zmiany stanu przyrządu. Jak zatem przebiega rzutowanie von Neumanna? W odpowiedzi na tak postawione pytanie można rozważyć tu następujący scenariusz rzutowania von Neumanna [149]. Mały układ kwantowy (qubit) wchodzi w oddziaływanie z podobnie niewielkim fragmentem przyrządu pomiarowego. W czasie pomiaru informacja o małym układzie kwantowym (qubicie) wczytywana jest kolejno w niewielkie i oddziaływujące ze sobą fragmenty przyrządu pomiarowego. Oddziaływanie między tymi fragmentami, niosące informację o mierzonym qubicie, rozprzestrzenia się jednak ze skończoną prędkością c (prędkość światła). Zapisanie informacji o qubicie zajmie więc czas $\sim \frac{L}{c}$ (L – długość przyrządu). W ten sposób można oszacować czas rzutowania von Neumanna. Taka interpretacja pomiaru wskazuje na istotnie relatywistyczny charakter pomiaru kwantowego i prawdopodobnie dlatego nie został on wyjaśniony (mimo wielu prób [147, 148]) w ramach nierelatywistycznej mechaniki kwantowej. W nierelatywistycznej mechanice kwantowej przyjmuje

się natychmiastowe włączanie oddziaływania w całej przestrzeni, co nie jest jednak prawdą — oddziaływania nie mogą rozprzestrzeniać się szybciej niż prędkość światła w próżni. Wydaje się, że wyjaśnienie rzutowania von Neumanna wymagać musi zrozumienia relatywistycznego charakteru kwantowego opisu i dlatego nie może być wyjaśnione unitarną ewolucją w ramach nierelatywistycznej teorii kwantowej (mimo podejmowania takich prób [147, 148]).

W tym aspekcie proponujemy możliwą ilustrację eksperymentalną relatywistycznej natury rzutowania von Neumanna. Prędkość światła w próżni wynosi c , ale w układach ze spowolnioną prędkością światła, obniżona wartość będzie decydować o szybkości przekazywania oddziaływania (elektromagnetycznego) i czas pomiaru kwantowego mógłby znacznie się wydłużyć. Znane i standardowo obserwowane promieniowanie Czerenkowa [150, 151], wysyłane jest przez elektron poruszający się w ośrodku materialnym z większą prędkością niż prędkość światła w tym ośrodku. Powstaje wtedy świetlna fala "uderzeniowa" skierowana do tyłu w stosunku do ruchu elektronu. Promieniowanie Czerenkowa obserwowane jest często przy reaktorach atomowych chłodzonych wodą, szybkie elektrony z reaktora wpadają do wody i mają tam większą prędkość od prędkości światła w wodzie (prędkość światła w wodzie wynosi około 225000 km/s i jest znacznie mniejsza od prędkości światła w próżni $c = 300000$ km/s i dlatego elektron może poruszać się szybciej niż 225000 km/s, choć wolniej niż c) – w wyniku powstaje błękitna poświata promieniowania Czerenkowa. Podobne zjawisko z falą dźwiękową występuje, gdy źródło dźwięku porusza się szybciej niż prędkość dźwięku w danym ośrodku (dobrze znane z sytuacji przekraczania bariery dźwięku przez odrzutowce). Wydaje się w tym kontekście, że nie można dokonać pomiaru optycznego nadlatującego elektronu Czerenkowa, podobnie jak nie można usłyszeć pocisku nadlatującego z prędkością większą od prędkości dźwięku.

A.3.9 Geometryczne własności macierzy gęstości — informacji kwantowej

Wykorzystując abstrakcyjne własności macierzy gęstości, ich hermitowskość, nieujemną określoność i jednostkowy ślad, łatwo przeprowadzić geometryzację zbioru macierzy gęstości danego wymiaru. Okazuje się, że zbiór macierzy gęstości danego układu kwantowego jest zbiorem wypukłym, co oznacza że wypukłą kombinacją liniową dwóch macierzy gęstości: $\hat{\rho}_1$ i $\hat{\rho}_2$, $\hat{\rho} = \lambda\hat{\rho}_1 + (1 - \lambda)\hat{\rho}_2$, $\lambda \in R$, $\lambda \in [0, 1]$, jest też macierzą gęstości (tzn. jest operatorem hermitowskim, nieujemnie określonym i o śladzie 1). Zbiór macierzy gęstości jest zbiorem wypukłym w zbiorze wszystkich operatorów liniowych i zawiera wszystkie punkty odcinków łączących dowolne dwa punkty tego zbioru.

Można zauważyć, że na brzegu zbioru macierzy gęstości (w przypadku n -wymiarowej przestrzeni Hilberta) leżą takie macierze gęstości, które mają co najmniej jedną zerową wartość własną (ponieważ są one na granicy między dodat-

nimi i ujemnymi wartościami własnymi i wobec własności nieujemności macierzy gęstości, muszą leżeć także na granicy zbioru macierzy gęstości). Jeśli wszystkie, za wyjątkiem jednej wartości własnej macierzy gęstości są równe zero — wtedy macierz gęstości odpowiada operatorowi rzutowania na jeden stan. Jest wtedy macierzą gęstości stanu czystego. Taka macierz leży na brzegu zbioru macierzy gęstości, ale dodatkowo jest jego tzw. punktem ekstremalnym zbioru wypukłego (punkt ekstremalny to taki punkt, przez który nie można przeprowadzić odcinka należącego w całości do tego zbioru wypukłego). Jest to zrozumiałe, ponieważ macierz gęstości stanu czystego nie może być przedstawiona jako wypukła kombinacja innych macierzy gęstości. Udowodnić to można nie wprost. Załóżmy, że macierz gęstości stanu czystego może być przedstawiona jako liniowa wypukła kombinacja dwóch innych macierzy gęstości:

$$|\Psi\rangle\langle\Psi| = \lambda\hat{\rho}_1 + (1 - \lambda)\hat{\rho}_2.$$

Wtedy dla dowolnego stanu $|\Phi\rangle$, ortogonalnego do $|\Psi\rangle$, mamy $\langle\Phi|\Psi\rangle\langle\Psi|\Phi\rangle = 0 = \lambda\langle\Phi|\hat{\rho}_1|\Phi\rangle + (1 - \lambda)\langle\Phi|\hat{\rho}_2|\Phi\rangle$, ale wobec nieujemności wszystkich macierzy gęstości mamy $\langle\Phi|\hat{\rho}_{1(2)}|\Phi\rangle = 0$. Na podstawie dowolności $|\Phi\rangle$ otrzymujemy $|\Psi\rangle\langle\Psi| = \hat{\rho}_1 = \hat{\rho}_2$, co przeczy założeniu.

W przypadku dwuwymiarowej przestrzeni Hilberta (czyli dla qubitów) wszystkie stany brzegowe są ekstremalne (wynika to faktu, że tylko jedna wartość własna może być zero w przypadku macierzy 2×2). W przypadku więcej wymiarowych przestrzeni, na brzegu wypukłego zbioru macierzy gęstości leżą nie tylko stany czyste (te są punktami ekstremalnymi brzegu).

Stany mieszane nie są punktami ekstremalnymi, ponieważ ich przedstawienie w postaci diagonalnej jest przykładem rozkładu wypukłego na inne macierze gęstości. Stany mieszane mogą być zatem punktami wewnętrznymi wypukłego zbioru wszystkich macierzy gęstości danego układu lub punktami brzegowymi, ale nie są punktami ekstremalnymi brzegu.

Dla stanów mieszanych mamy wiele możliwych rozkładów macierzy gęstości, których jednak nie możemy zidentyfikować pomiarami (średnia dowolnej obserwabli nie zależy bowiem od wypukłego rozkładu danej macierzy gęstości). Stan czysty, jako punkt ekstremalny, nie dopuszcza jednak żadnych wypukłych rozkładów tego stanu. Ta ukryta niejednoznaczność (nieдоступna dla pomiarów), charakterystyczna dla stanów mieszanych, jest kolejną istotną cechą kwantowej informacji zawartej w stanach mieszanych danego układu. Podobnie jak splątanie, nie posiada ona klasycznego odpowiednika.

Geometria qubitów — zbiór wypukły macierzy gęstości qubitów (sfera Blocha)

Opisane wyżej geometryczne własności informacji kwantowej najłatwiej zilustrować na przykładzie qubitów. Macierze gęstości qubitów są zespolonymi macierzami 2×2 . Nałożenie warunku hermitowskości powoduje ograniczenie rzeczywistych

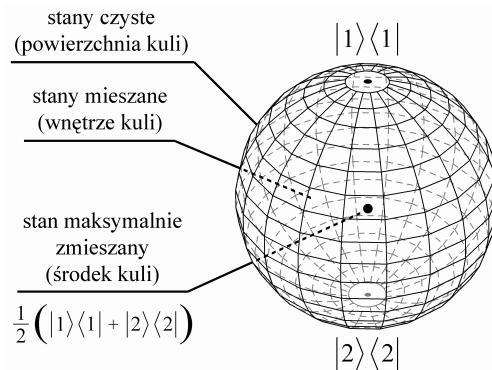
parametrów takiej macierzy do czterech, co oznacza, że można dowolną macierz hermitowską 2×2 przedstawić jako liniową kombinację, o rzeczywistych współczynnikach, czterech macierzy hermitowskich:

$$\hat{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

trzy ostatnie macierze to macierze Pauliego. Macierze Pauliego są bezśladowe, natomiast macierz jednostkowa ma ślad 2. Ograniczenie zatem do macierzy hermitowskich ze śladem 1 ogranicza liczbę współczynników do 3: $\mathbf{P} = (P_x, P_y, P_z)$, które można traktować jako współrzędne wektora rzeczywistego,

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}(\hat{1} + \mathbf{P} \cdot \hat{\sigma}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + P_z & P_x - iP_y \\ P_x + iP_y & 1 - P_z \end{pmatrix}. \quad (\text{A.39})$$

Warunek nieujemności macierzy gęstości nakłada dalsze ograniczenie. W przypadku macierzy 2×2 , warunek ten (który równoważny jest z nieujemnością jej wartości własnych) sprowadza się do warunku $\lambda_1 \lambda_2 \geq 0$ (gdyż równocześnie dla macierzy gęstości qubitów $\lambda_1 + \lambda_2 = 1$). Iloczyn wartości własnych macierzy równy jest jej wyznacznikowi. Zatem $\det(\hat{\rho}) = (1 - P^2)/4 \geq 0 \rightarrow 0 \leq P^2 \leq 1$. Oznacza to, że zbiór macierzy gęstości qubitów jest izomorficzny z kulą jednostkową (nazywaną kulą Blocha) – zobacz rys. A.3.



Rys. A.3. Sfera Blocha jest kulą jednostkową w abstrakcyjnej przestrzeni 3D (tradycyjnie używa się nazwy sfera), wg [28].

Zgodnie z przedstawionymi w poprzednim podrozdziale ogólnymi własnościami zbiorów wypukłych macierzy gęstości, wnętrze kuli Blocha stanowią stany mieszane, natomiast powierzchnia tej kuli, to stany czyste. Wszystkie punkty brzegu kuli są ekstremalne, czyli na sferze Blocha leżą tylko stany czyste.

Punkty wewnętrzne kuli Blocha mogą być przedstawione na nieskończenie wiele sposobów jako wypukłe kombinacje pary punktów ekstremalnych, czyli końców cięciwy kuli przechodzącej przez dany punkt wewnętrzny. Punkt środkowy kuli $\mathbf{P} = 0$ odpowiada macierzy gęstości $\hat{\rho} = \frac{1}{2}\hat{1}$. W tym przypadku końce średnicy

wyznaczają parę stanów czystych, które po zmieszaniu w proporcjach $\frac{1}{2}$ tworzą maksymalnie zmieszany stan mieszany.

A.3.10 Stany Bella

Najprostszym układem oddziałującym, czyli takim, w którym może wystąpić splątanie, jest para qubitów (z 4-wymiarową przestrzenią Hilberta). W przestrzeni tej można wybrać bazę ze stanów niesplątanych: $|1\rangle_A \otimes |1\rangle_B$, $|2\rangle_A \otimes |1\rangle_B$, $|1\rangle_A \otimes |2\rangle_B$, $|2\rangle_A \otimes |2\rangle_B$. Bazę tę można jednak wybrać inaczej. W szczególności jako bazę złożoną z maksymalnie splątanych stanów, tj. odpowiadających maksymalnie zmieszanemu stanowi zarówno układu A jak i B — ze środków sfer Blocha obu qubitów. Taka baza może mieć postać:

$$\begin{aligned} |\Psi^+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle_A \otimes |2\rangle_B + |2\rangle_A \otimes |1\rangle_B), \\ |\Psi^-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle_A \otimes |2\rangle_B - |2\rangle_A \otimes |1\rangle_B), \\ |\Phi^+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle_A \otimes |1\rangle_B + |2\rangle_A \otimes |2\rangle_B), \\ |\Phi^-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle_A \otimes |1\rangle_B - |2\rangle_A \otimes |2\rangle_B). \end{aligned} \tag{A.40}$$

Wektory te nazywane są stanami Bella, a baza nazywana jest bazą Bella. Działania na stanach splątanych mogą prowadzić do nieklasycznych (wykorzystujących kwantowe splątanie) efektów dotyczących informacji kwantowej, które nie mają swojego klasycznego odpowiednika. Do takich efektów należy zaliczyć procedury supergęstego kodowania [18, 19, 20] i teleportacji kwantowej [152, 153], które przedstawimy skrótowo w następnym podrozdziale.

A.3.11 No-Cloning, No-Broadcasting, No-Deleting dla informacji kwantowej

Nieznany, czysty stan kwantowy nie może być skopiowany [154]. W przeciwnym przypadku prowadziłyby to do naruszenia zasad nieoznaczoności — na jednym stanie można by dokonać pomiaru np. położenia, a na kopii pomiaru pędu. Bardziej precyzyjny dowód niemożności kopiowania czystego i nieznanego stanu kwantowego przeprowadzić można w następujący sposób. Załóżmy, że mamy operator \hat{A} dokonujący kopiowania stanu kwantowego, tj. $\hat{A}|\Psi\rangle = |\Psi\rangle|\Psi\rangle$. Zatem $\hat{A}(a_1|1\rangle + a_2|2\rangle) = (a_1|1\rangle + a_2|2\rangle)(a_1|1\rangle + a_2|2\rangle) = a_1^2|1\rangle|1\rangle + a_1a_2|1\rangle|2\rangle + a_2a_1|2\rangle|1\rangle + a_2^2|2\rangle|2\rangle$. Operator ten jest nieliniowy i dlatego nie może spełnić warunku liniowości (wymaganego przez zasadę superpozycji), gdyż gdyby założyć liniowość, to: $\hat{A}(a_1|1\rangle + a_2|2\rangle) = a_1|1\rangle|1\rangle + a_2|2\rangle|2\rangle$ — obydwie równania mogą być zgodne tylko wtedy, gdy stan kopiowany to stan $|1\rangle$ lub $|2\rangle$ (czyli jest znany; wtedy albo $a_1 = 1, a_2 = 0$, albo $a_1 = 0, a_2 = 1$).

W podobny sposób można wykazać, że nie można wymazać informacji kwantowej (*No-Deleting* [155, 156, 157]) — również wynika to z niemożności liniowej

reprezentacji takiej operacji. *No-Cloning* prowadzi także do niemożności rozpo-
wszechniania informacji kwantowej: *No-Broadcasting* [158, 159]. Te cechy infor-
macji kwantowej odróżniają zasadniczo informację kwantową od klasycznej, dla
której własności *No-Cloning*, *No-Deleting*, *No-Broadcasting* nie obowiązują.

A.3.12 Oscylacje Rabiego

Jedno-qubitowe operacje – ustawianie dowolnej superpozycji qubitów $|\Psi\rangle = a_1|1\rangle + a_2|2\rangle$ realizować można przy pomocy tzw. oscylacji Rabiego [149]. Dla ściśle dwupoziomowego układu (qubit) [w praktyce, gdy zaniedbać możliwości przejść do innych poziomów (np. atom z dostatecznie odległymi od pozostałych stanów parą poziomów)] rozpatrzmy zaburzenie oscylacyjne o częstości pobliskiej (lub równej) odległości energetycznej danej pary poziomów.

Rozważmy dwa stany stacjonarne układu dwupoziomowego:

$$H_0|1\rangle = E_1|1\rangle,$$

$$H_0|2\rangle = E_2|2\rangle.$$

Zaburzenie zewnętrzne (dla przykładu, oddziaływanie z falą e-m w przybliżeniu dipolowym³ w postaci potencjału pola e-m,

$$V(t) \sim V_0 \cos(\omega t)$$

proceedzi do zaburzenia hamiltonianu w postaci⁴ $[\mu_Z - \text{moment dipolowy}]$,

$$H' = -\mu_z E = -\mu_z (E_0 e^{i\omega t} + c.c.).$$

Pod wpływem tego zaburzenia następuje zależna od czasu (niestacjonarna) ewolucja układu opisana funkcją falową, która może być jednak przedstawiona jako liniowa kombinacja $|1\rangle$ i $|2\rangle$, tj.

$$|\Psi(t)\rangle = a_1(t)|1\rangle + a_2(t)|2\rangle$$

i spełnia równanie

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} = (H_0 + H')|\Psi(t)\rangle.$$

Przy założeniu izotropowości stanów $|1\rangle$ i $|2\rangle$, (mamy wtedy $\langle 1|\mu_z|1\rangle = \langle 2|\mu_z|2\rangle = 0$) znajdujemy równania,

$$i\hbar \frac{\partial a_1}{\partial t} = a_2 \langle 1'| -\frac{1}{2}\mu_z E|2'\rangle [e^{i(\omega-\omega_0)t} + e^{-i(\omega+\omega_0)t}],$$

$$i\hbar \frac{\partial a_2}{\partial t} = a_1 \langle 1'| -\frac{1}{2}\mu_z E|2'\rangle [e^{i(\omega+\omega_0)t} + e^{-i(\omega-\omega_0)t}],$$

³długość fali znacznie większa niż rozmiary układu

⁴wybieramy pole E wzdłuż osi z

gdzie $\omega_0 = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$, ze stanów stacjonarnych wydzielono funkcje czasowe, tj. $|i\rangle = e^{-iE_i t/\hbar} |i'\rangle$.

W tych równaniach pomija się człony szybko zmienne $e^{\pm i(\omega + \omega_0)t}$ (jest to tzw. przybliżenie wirujących osi) [160] – dawałyby one dodatkową drobno-oscylicyjną strukturę nałożoną na wolnozmienną zależność. Taka szybko-oscylicyjna struktura nie jest możliwa do obserwacji z powodu rozdzielczości czasowej i należy ją traktować po uśrednieniu na większych przedziałach czasowych – dlatego można te człony pominąć.

Po pominięciu szybkozmiennych funkcji układ równań różniczkowych można zapisać w postaci,

$$\frac{\partial^2 a_1}{\partial t^2} - i(\omega - \omega_0) \frac{\partial a_1}{\partial t} + \frac{|x|^2}{4} a_1 = 0,$$

gdzie $x = \frac{\langle 1' | \mu_z E | 2' \rangle}{\hbar}$. Równanie to ma rozwiązanie (jest to liniowe równanie),

$$a_1 = \left(A_1 e^{i\Omega t/2} + B_1 e^{-i\Omega t/2} \right) e^{i(\omega - \omega_0)t/2},$$

gdzie $\Omega = \sqrt{(\omega - \omega_0)^2 + |x|^2}$. Wybierając warunki początkowe, $a_1(0) = 0$ (wtedy $a_2(0) = 1$, z warunku unormowania $|a_1|^2 + |a_2|^2 = 1$) dobieramy stałe A_1 i B_1 . Mamy wtedy,

$$a_1(t) = \frac{ix}{\Omega} \sin \frac{\Omega t}{2} e^{i(\omega - \omega_0)t/2},$$

$$a_2(t) = \left(\cos \frac{\Omega t}{2} - \frac{\omega - \omega_0}{2\Omega} \sin \frac{\Omega t}{2} \right) e^{i(\omega - \omega_0)t/2}.$$

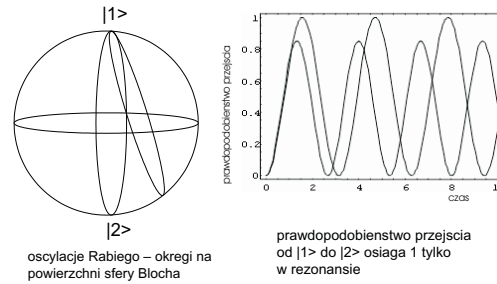
Z powyższych równań otrzymujemy prawdopodobieństwo znajdowania się układu w stanie $|1\rangle$,

$$|a_1(t)|^2 = \frac{|x|^2}{\Omega^2} \left(\sin \frac{\Omega t}{2} \right)^2$$

(zobacz rys. A.4). Te oscylacje nazywane są oscylacjami Rabiego.

Po tzw. π impulsie, tj. po czasie $t = \frac{\pi}{\Omega}$ 'zapełnienie' stanu $|1\rangle$ osiąga maksimum — maksimum to równe jest 1 tylko dla rezonansu, tj. gdy $\omega = \omega_0$ (poza rezonansem jest mniejsze od 1). Częstość oscylacji Rabiego, czyli cyklicznych przejść między stanami $|1\rangle$ i $|2\rangle$ i równoczesnym cyklicznym wysyłaniu i pochłanianiu fotonu, jest proporcjonalna do elementu macierzowego (w rezonansie, $\Omega = |x|$), tzn. jest tym większa im większe jest E , czyli intensywność fal e-m (np. wiązki laserowej).

Należy dodać, że dla impulsu skończonego w czasie (np. π -impulsu) nie można mieć ściśle monochromatycznej fali e-m — zatem spełnienie w praktyce wszystkich warunków dla oscylacji Rabiego możliwe jest tylko w przybliżeniu, niemniej jednak jest dobrze potwierdzone w eksperymentach spektroskopii atomowej. Oscylacje Rabiego występują dla każdego dwupoziomowego układu (qubit), przy zaburzeniu o niezerowym elemencie macierzowym między obydwoma stanami qubit



Rys. A.4. Oscylacje Rabiego osiągają prawdopodobieństwo przejścia między dwoma stanami tylko w rezonansie; poza rezonansem oscylacje Rabiego są niepełne.

i dopasowaniu częstością do odległości energetycznej stanów qubitu (qubit rozpięty na swoich stanach stacjonarnych), w szczególności dla stanów spinowych w kierunku z i oddziaływania Pauliego w kierunku poprzecznym (x lub y).

A.4 Protokoły kwantowe

A.4.1 Supergęste kodowanie kwantowe

Łatwo zauważyć, że z postaci stanów Bella (podanych równaniami (A.40) wynika, że wykonując tylko lokalne operacje na qubicie B można otrzymać wszystkie stany Bella z jednego, a mianowicie:

$$\begin{aligned}
 |1\rangle_B \rightarrow |1\rangle_B, |2\rangle_B \rightarrow |2\rangle_B &\implies |\Psi^+\rangle \rightarrow |\Psi^+\rangle, \\
 |1\rangle_B \rightarrow -|1\rangle_B, |2\rangle_B \rightarrow |2\rangle_B &\implies |\Psi^+\rangle \rightarrow |\Psi^-\rangle, \\
 |1\rangle_B \rightarrow |2\rangle_B, |2\rangle_B \rightarrow |1\rangle_B &\implies |\Psi^+\rangle \rightarrow |\Phi^+\rangle, \\
 |1\rangle_B \rightarrow -|2\rangle_B, |2\rangle_B \rightarrow |1\rangle_B &\implies |\Psi^+\rangle \rightarrow |\Phi^-\rangle.
 \end{aligned} \tag{A.41}$$

Taka sytuacja oznacza podwojenie możliwości kodowania informacji w stosunku do klasycznej pary bitów: 00, 01, 10, 11. W przypadku pary klasycznych bitów, w celu otrzymania wszystkich czterech stanów pary bitów, konieczne były zmiany (kodowanie) obydwu bitów. Odnosi się to również do bazy przestrzeni, złożonej z niesplątanych stanów, tj. bazy: $|1\rangle_A \otimes |1\rangle_B$, $|2\rangle_A \otimes |1\rangle_B$, $|1\rangle_A \otimes |2\rangle_B$, $|2\rangle_A \otimes |2\rangle_B$ (w tym przypadku także należy kodować na obu qubitach). Jeśli jednak wykorzystać kwantowe splątanie i posłużyć się bazą (A.40), to kodowanie można przeprowadzić tylko na jednym z pary qubitów. Ten kwantowy efekt nazywany jest supergęstym kodowaniem i może być wykorzystywany do przetwarzania informacji kwantowej [28, 18, 19, 20, 21].

A.4.2 Teleportacja kwantowa

Drugim ważnym przykładem prostego wykorzystania splątania kwantowego jest zjawisko teleportacji kwantowej [152, 153]. Można opisać je w następujący sposób. Załóżmy, że mamy cząstkę A (qubit A) w stanie czystym: $|\phi\rangle_A = a_1|1\rangle_A + a_2|2\rangle_A$, $|a_1|^2 + |a_2|^2 = 1$, i chcemy przesłać (teleportować) ten stan na cząstkę C (qubit C), odległą od cząstki A. W tym celu można posłużyć się cząstką pomocniczą B (qubitem B), w taki sposób, że przygotowujemy parę cząstek CB w stanie splątanym. Może to być jeden z maksymalnie splątanych stanów Bella — np. stan $|\Psi^-\rangle_{CB} = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle_C \otimes |2\rangle_B - |2\rangle_C \otimes |1\rangle_B)$. Realizację tego stanu splątanego można przeprowadzić posługując się przyrządem pomiarowym realizującym pomiar na parze cząstek (w tym przypadku CB), tak zorganizowanym, że jego operator hermitowski ma przedstawienie spektralne w postaci operatorów rzutowania na cztery stany Bella qubitów C i B. Taki pomiar, czyli rzutowanie von Neumanna, na stany Bella (A.40), wiąże się z oddziaływaniem cząstek (qubitów) C i B, w wyniku którego powstaje kwantowe splątanie. Jednakże i w tym przypadku, podobnie jak w każdym pomiarze kwantowym, nie wiadomo z góry, który ze stanów Bella zostanie wybrany, ponieważ rzutowanie von Neumanna jest przypadkowe.

Założmy, że w wyniku pomiaru w bazie Bella na parze qubitów C i B powstanie w wyniku rzutowania von Neumanna stan $|\Psi^-\rangle_{CB}$. Wtedy cały układ trzech qubitów ABC znajdzie się w stanie czystym,

$$\begin{aligned}
|\Omega\rangle_{ABC} &= |\phi\rangle_A \otimes |\Psi^-\rangle_{CB} \\
&= (a_1|1\rangle_A + a_2|2\rangle_A) \otimes \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle_C \otimes |2\rangle_B - |2\rangle_C \otimes |1\rangle_B)\right) \\
&= 1/2|\Psi^+\rangle_{AB} \otimes (-a_1|1\rangle_C + a_2|2\rangle_C) \\
&+ 1/2|\Psi^-\rangle_{AB} \otimes (-a_1|1\rangle_C - a_2|2\rangle_C) \\
&+ 1/2|\Phi^+\rangle_{AB} \otimes (a_1|2\rangle_C - a_2|1\rangle_C) \\
&+ 1/2|\Phi^-\rangle_{AB} \otimes (a_1|2\rangle_C + a_2|1\rangle_C).
\end{aligned} \tag{A.42}$$

Równość powyższa jest tożsamościowym algebraicznym związkiem wynikającym z możliwości zapisu tego samego wektora w przestrzeni liniowej poprzez zamianę bazy w ośmiowymiarowej przestrzeni $\mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B \otimes \mathcal{H}_C$. W szczególności, wektor $|\Omega\rangle_{ABC}$ może być przedstawiony w bazie tej przestrzeni o postaci: $|\Psi^+\rangle_{AB} \otimes |1\rangle_C$, $|\Psi^-\rangle_{AB} \otimes |1\rangle_C$, $|\Phi^+\rangle_{AB} \otimes |1\rangle_C$, $|\Phi^-\rangle_{AB} \otimes |1\rangle_C$, $|\Psi^+\rangle_{AB} \otimes |2\rangle_C$, $|\Psi^-\rangle_{AB} \otimes |2\rangle_C$, $|\Phi^+\rangle_{AB} \otimes |2\rangle_C$, $|\Phi^-\rangle_{AB} \otimes |2\rangle_C$. Przy takim wyborze bazy współczynniki a_i znajdują się jednak przy qubicie (cząstce C), chociaż początkowo były przy qubicie A. Znajdują się one przy qubicie C, ale w wielu różnych kombinacjach. Należy zauważyć, że jest to wynik możliwości zmiany bazy w przestrzeniach Hilberta wielo-cząstkowych (wielo-qubitowych) układów, przy wykorzystaniu stanów splątanych. Następnie można zbliżyć do siebie cząstki A i B i dokonać z kolei na tej parze pomiaru stanów Bella, tzn. wprowadzić ich oddziaływanie za pośrednictwem takiego pomiaru. W wyniku tego pomiaru zostanie wybrany w sposób przypadkowy (niemożliwy do przewidzenia z góry) jeden z czterech stanów Bella

pary AB. Równocześnie jednak, zgodnie z (A.42) zostanie także wtedy wybrany stan czysty cząstki C, już tylko z jedną kombinacją nieznanymi współczynników a_1 i a_2 (które zamierzaliśmy przeteleportować z qubitu A na qubit C).

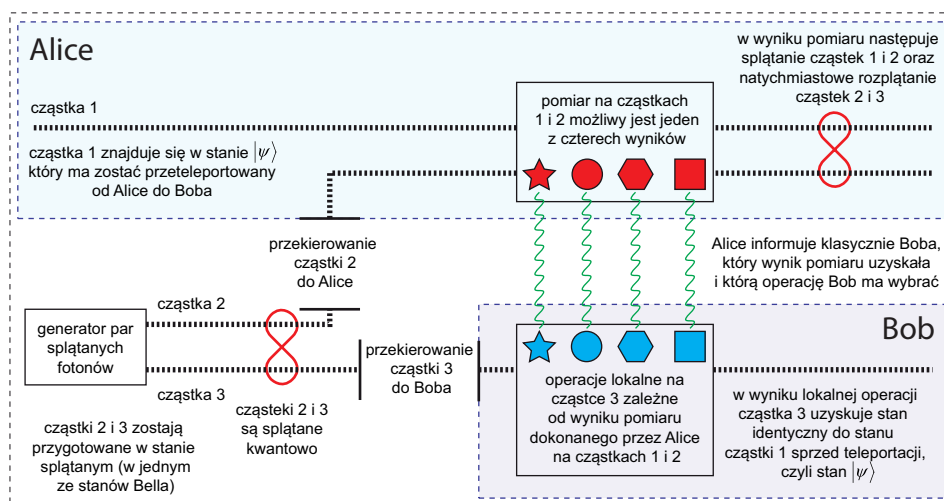
W szczególności, na przykład gdy po rzutowaniu von Neumanna na stany Bella pary AB znajdzie się ona w stanie $|\Phi^-\rangle_{AB}$, cząstka C będzie wtedy z pewnością w stanie $a_1|2\rangle_C + a_2|1\rangle_C$. Wystarczy wtedy na cząstce C (odległej) dokonać już tylko lokalnej zamiany stanów $|1\rangle_C$ i $|2\rangle_C$, po to by otrzymać ten sam stan, jaki na początku miała cząstka A. Z góry nie wiadomo było jednak, który z wyników rzutowania na stany Bella się zrealizuje. Dla przykładu założyliśmy, że czwarty, ale rzutowanie von Neumanna jest przypadkowe i dopiero po jego zrealizowaniu wiadomo co należy zrobić lokalnie na qubicie C, żeby otrzymać pożądaną stan, taki jakim był wyjściowy stan na qubicie A.

Łatwo zauważyć, że w celu przeprowadzenia skutecznej teleportacji z A na C, konieczne jest przekazanie klasycznej informacji, który ze stanów Bella zrealizował się w pomiarze von Neumanna na parze AB. Tę klasyczną informację należy przesłać do obserwatora przy qubicie C (Bob), za pomocą klasycznych kanałów łączności (informację tę może wysłać obserwator qubitu A, który dokonał pomiaru stanów Bella na parze AC — Alice).

Konieczność przesłania dodatkowej klasycznej informacji powoduje, że w czasie całego procesu występuje ograniczenie prędkości teleportacji kwantowej przez prędkość światła (w kanale klasycznym), chociaż kwantowa informacja znalazła się na cząstce B natychmiastowo, ale w nieczytelny dla Boba sposób. Fakt ten zwraca uwagę, że układ z informacją klasyczną oznacza zatem coś innego, niż układ bez tej informacji klasycznej,

Ważne jest też zauważenie, że pomiar dokonany przez Alice na parze AB powoduje splątanie cząstek A i B, ale równocześnie rozplątanie cząstek C i B — po tym pomiarze cząstka C jest już w stanie czystym, chociaż nie wykonywano na niej pomiaru. Równocześnie jednak cząstka A splątuje się z B (i para AB nie ma już żadnej informacji o współczynnikach a_1 i a_2 — ta informacja znajduje się już w całości na qubicie C). W wyniku dokonania pomiaru, czyli w wyniku oddziaływania, można zatem odplątywać cząstki (qubity), działając tylko na jednym ze splątanych qubitów (w rozważanym przypadku działając na qubit B, można odplątać qubit C). Innym, istotnym aspektem w przedstawionym protokole jest zasada *No-Cloning* — stan czysty znika z cząstki A i pojawia się na cząstce C, nie ma więc kopiowania stanu kwantowego, ale następuje jego przesyłanie (teleportacja). Qubit C może być dowolnie oddalony od qubitu B, pod warunkiem utrzymania wyjściowego splątania BC, co oznacza, że teleportacja może być dokonywana na dowolne odległości (tzn. na takie, dla których można utrzymać splątanie).

Teleportacja kwantowa jest przykładem ważnego procesu odplątywania stanów kwantowych. Poprzez rzutowanie von Neumanna w bazie stanów splątanych



Rys. A.5. Schematyczne przedstawienie procesu teleportacji kwantowej: do cząstki 2, splątanej kwantowo z cząstką 3, dopłtuje się, przez pomiar na parze 1-2, cząstkę 1, wtedy cząstka 3 odplątuje się, a stan z cząstki 1 może być przeniesiony na cząstkę 3, pod warunkiem wykonania odpowiedniego pomiaru na tej cząstce (skorelowanego z wcześniej nieznanym wynikiem pomiaru na parze 1-2).

qubitów AB, qubit C odplątuje się i uzyskuje stan czysty. Odbywa się to bez udziału qubitów A i B, a tylko lokalnie na qubitach A i B (choć B był początkowo splątany z C).

A.5 Algorytmy kwantowe

Najbardziej oczekiwanym urządzeniem z zakresu informatyki kwantowej jest komputer kwantowy. Realizować by on mógł dowolną unitarną ewolucję kwantową. Według twierdzenia sformułowanego przez Davida DiVincenzo, dowolną ewolucję unitarną wieloqubitową przedstawić można jako sekwencję operacji jednoqubitowych i pojedynczej wybranej operacji dwuqubitowej. Ta uniwersalna dwuqubitowa operacja wprowadza element sterowanego splątania kwantowego i może być wybrana dowolnie. Najczęściej wybierana jest w postaci bramki CNOT (na wektorach bazowych). Możliwość dekompozycji dowolnej kwantowej ewolucji w postaci ciągu elementarnych jedno i dwuqubitowej operacji jest kwantowym analogiem algebry Boole'a w klasycznym przypadku i podobnie do klasycznego przypadku, prowadzi do kwantowej algorytmiki. W przeciwieństwie jednak do wielkiej mnogości klasycznych algorytmów, rodzina znanych obecnie algorytmów kwantowych (tabela) nie jest szeroka i w większości kwantowe algorytmy opierają się o szybką kwantową transformację Fouriera.

Znane algorytmy kwantowe

Autor algorytmu		Przyspieszenie w porównaniu z klasycznymi procedurami
Algorytm Deutscha i Jozsy, 1992	"Oracle setting", rozróżnienie funkcji zbalansowanej (funkcja o tej samej liczbie wartości 0,1 lub 1,0 na bicie) od stałej (0,0 lub 1,1 na bicie) na rejestrze N bitów	przysp. eksponencjalne
Algorytm Simona, 1997	Rozróżnienie funkcji wzajemnie jednoznacznej 1-1 od funkcji 'sklejającej' 2-1 na rejestrze N bitów	przysp. eksponencjalne
Algorytm Shora dla faktoryzacji, 1994	Znajdowanie liczb pierwszych (faktoryzacja)	przysp. eksponencjalne
Transformata Fouriera, Kitaev, 1995	Szybka kwantowa transformata Fouriera — podstawa wszystkich algorytmów kwantowych	
Algorytm Grovera, 1995	"Finding needle in a haystack", przeszukiwanie bazy danych	przysp. kwadratowe
Algorytm Shora kwantowej korekty błędów, 1996	Kwantowa korekta błędów	

Wykorzystanie splątania kwantowego do zaprojektowania kwantowych algorytmów ma podstawowe znaczenie, natomiast sprzętowo oznacza to opanowanie sterowania oddziaływaniem dwóch qubitów. Dodatkowo możliwość realizacji kwantowej korekty błędów zapewnić ma skalowanie komputera kwantowego do pełnosprawnej maszyny – taką byłby komputer o wydawałoby się, niewielkiej liczbie qubitów – rzędu zaledwie 1000. Możliwości takiej maszyny należy jednak odnosić do wymiaru przestrzeni Hilberta układu tych qubitów – czyli 2^{1000} . Taka pojemność informatyczna przekracza wszystkie istniejące i wyobrażalne klasyczne systemy. Taki komputer kwantowy mógłby realizować nie tylko algorytmy kwantowe (wymienione w poniższej tabeli) ale także mógłby przeprowadzać teleportację kwantową, czy kwantowe symulacje dowolnych układów. Sprawność i możliwości komputera kwantowego rosną eksponencjalnie wraz z liczbą qubitów (cząstek kwantowych wspólnie sterowalnych), ale też wtedy narasta eksponencjalnie dekoherencja i dlatego niełatwo jest zbudować duży komputer kwantowy, choć 3 – 8 qubitowe zbudowano już w kilku technologiach.

A.6 Ograniczenia kwantowego przetwarzania informacji

Idealne procedury kwantowe, zapewniające realizację kwantowych schematów, zaburzane są przez nieuchronną dekoherencję – niekontrolowany wpływ infor-

macji kwantowej do otoczenia, w wyniku oddziaływania z otoczeniem. Jeśli jednak dekoherencję utrzymać poniżej określonego progu, to można naprawiać błędy kwantowe, wg schematu tzw. kwantowej korekty błędów [23], i w ten sposób zrealizować dowolne procedury dla komputera kwantowego, lub innych kwantowych schematów.

Korekta błędów w klasycznej informatyce polega na zwielokrotnieniu klasycznej informacji i weryfikowaniu, co pewien czas, zwielokrotnionego rejestru – pojawiające się (mniejszościowo) pomyłki są na bieżąco usuwane. W kwantowym przypadku nie jest możliwe zwielokrotnienie informacji kwantowej (*No-Cloning*) i kwantowa korekta błędów opiera się na innym schemacie: na poszukiwaniu bardziej odpornych na dekoherencję fragmentów przestrzeni Hilberta (takimi odpornymi na dekoherencję są stany wielo-qubitowe, które zapisują symetrycznie równocześnie ”prawdę i nieprawdę” w parze qubitów, np. stany typu singlet pary qubitów; symetryzowanie informacji, czyli stanów kwantowych, wymaga jednak zwielokrotnienia kwantowych rejestrów, co wzmaga silnie [eksponencjalnie] dekoherencję).

Wymóg zwielokrotnienia układu w celu zastosowania kwantowej korekty błędów prowadzi do konieczności silnego ograniczenia dekoherencji i utrzymania jej poniżej pewnego poziomu. Odpowiednie kryteria podane zostały przez D. DiVincenzo [16, 17, 26, 24], określają one możliwość implementacji kwantowej korekty błędów (charakterystyczny czas dekoherencji musi być co najmniej 6 rzędów dłuższy niż charakterystyczny czas operacji kwantowych).

W licznych proponowanych rozwiązaniach dla komputera kwantowego nie osiągnięto takiej relacji czasowej. Związane jest to z faktem, że te same oddziaływania, które pozwalają na sterowanie qubitami (operacje logiczne), są odpowiedzialne równocześnie za dekoherencję. Operacje logiczne są tym szybsze im silniejsze (energetycznie) są te oddziaływania. Ale z tych samych oddziaływań korzysta też otoczenie i silniej wywołuje efekty dekoherencyjne. W nanotechnologicznych i optycznych realizacjach komputerów kwantowych (kilku-qubitowych) nie przekroczono obecnie różnicy 3 rzędów wielkości szybkości operacji kwantowych w stosunku do dekoherencji.

Perspektywicznym wydaje się jednak wykorzystanie nielokalnych topologicznych stopni kwantowych jako nośników informacji kwantowej w naturalny sposób odpornych na dekoherencję z natury lokalną. Techniczne opanowanie sterowania topologicznymi stopniami swobody jest jednak raczej jeszcze nie osiągalne. Najbardziej zaawansowane są wdrożenia w pośrednim obszarze – nielokalnym choć nie w topologicznej skali, a tylko w zakresie kilkaset razy przekraczającym zasięg dekoherencji. Tego typu rozwiązanie oferują kwantowe stany nadprzewodzące i qubity oraz dwuqubitowe bramki oparte o złącza Josephsona. Tego typu rozwiązania zastosowano w najnowszych osiągnięciach, w komputerze kwantowym

D-Wave-One ⁵ i w skalowalnej bramce IBM ⁶.

Wymagania sprzętowe w przypadku kryptografii kwantowej [23, 161, 162] nie są tak wygórowane odnośnie dekoherencji i dlatego ta technika kwantowa (dystrybucja klucza kwantowym kanałem) została zrealizowana w praktyce w układach optycznych [światłowodowych, na odległościach ponad 10 km (do 1000 km), i w otwartej atmosferze na odległości 2 km].

A.6.1 Stopień zaawansowania technik informatyki kwantowej

W poniższej tabeli zestawione są rozmaite, zrealizowane i przewidywane techniki z zakresu informatyki kwantowej, z uwzględnieniem doniesień z lat 2011 i 2012. Najbardziej zaawansowane technicznie są realizacje kryptografii kwantowej, a zwłaszcza technologii dystrybucji klucza kanałem kwantowym przy wykorzystaniu niesplątanych fotonów. Niektóre z przewidywanych urządzeń kwantowych są intensywnie rozwijane, ale jednak wciąż nie osiągnęły oczekiwanej funkcjonalności – do takich realizacji należy kwantowy repeater warunkujący dalekozasięgową łączność chronioną kwantowo-kryptograficznie (w tym łączność przez Atlantyk). Według prognoz i szacunkowych ocen postęp w tym zakresie przewidywany jest w skali 5 – 10 letniej. Warto tu zauważyć, że podobne przewidywania odnośnie budowy skalowalnego komputera kwantowego (określane w kategoriach 20 lat) mogą ulec weryfikacji i skróceniu wobec ostatnich doniesień o skonstruowaniu skalowalnej bramki w technologii nadprzewodnikowej, co komentowane jest jako znaczące przełomowe osiągnięcie.

⁵<http://www.dwavesys.com/en/products-services.html>

⁶<http://www.wired.com/wiredenterprise/2012/02/ibm-quantum-milestone/>

Stopień zaawansowania technik informatyki kwantowej

Rodzaj hardware	Liczba qubitów	Liczba kroków przed dekoherencją	Status
Kwantowa kryptografia pojedynczych qubitów	1	1	zaimplementowana (produkt rynkowy)
Kwantowa kryptografia na stanach splątanych	2	1	zademonstrowana
Bramka CNOT	2	1	zademonstrowana
Układ bramek	2	2	zademonstrowany
Algorytm Deutscha	2	3	zademonstrowany
Zdwojenie pojemności kanału	2	2	blisko realizacji
Teleportacja	3	2	zademonstrowana (fotony na odl. 10 km w światłowodzie, elektrony na odl. 1cm)
Wymiana splątania	4	1	zademonstrowana
Repeater dla kryptografii	kilka	kilka	przewidywany
Kwantowa symulacja	kilka	kilka	prosta demonstracja
Algorytm Grovera z <i>toy-data</i>	3+	6+	zademonstrowany
Ultra-precyzyjny standard częstości	kilka	kilka	przewidywany
Purifikacja splątania	kilka	kilka	przewidywana
Komputer kwantowy (<i>toy-demo</i>)	3-5 (128?)	10-100	zademonstrowane
Komputer na spląpowanych jonach	3-8 qubitów		zademonstrowane
Komputer spinowy NMR	3-8 qubitów		zademonstrowane
Komputer nadprzewodnikowy			IBM (bramka skalowalna), D-Wave (128 qubitów)
Algorytm Shora z <i>toy-data</i> Kwantowa maszyna fakturująca	16+ 100+	100+ 1000	poszukiwana realizacja
Uniwersalny komputer kwantowy	1000+	1000+	

A.6.2 Kryteria DiVincenzo

Określenie warunków jakie powinny być spełnione w celu skonstruowania komputera kwantowego przypisuje się Davidowi DiVincenzo (IBM) [16, 17, 24, 25, 163, 26, 164]. Warunki te uwzględniają specyfikę związaną z odpowiednią definicją qubitu oraz uniwersalnej bramki dwuqubitowej, przy wymogu implementacji kwantowej korekty błędów. Oszacowane są niezbędne szybkości sterowania pojedynczym qubitem i bramką uniwersalną w stosunku do dekoherencji tych układów przez otoczenie. Stosunek tych czasów wynika ze sposobu organizacji kwantowej korekty błędów w postaci powielenia układu i kodowania informacji w uogólnionych stanach typu singlet. Nie jest wykluczone, że te stosunkowo rygorystyczne kryteria (jak podane w tabeli poniżej) mogą być złagodzone poprzez opracowanie nowej koncepcji kwantowej korekcji błędów, jednak mimo poszukiwań, jeszcze takiej nie podano. Innym aspektem kryteriów DiVincenzo jest zorganizowanie wejścia i wyjścia komputera kwantowego w celu integracji z klasycznymi systemami informatycznymi. W związku z naturą wzajemnej relacji informacji klasycznej i kwantowej, wejście i wyjście komputera kwantowego powinno być zorganizowane w schemacie rzutowania von Neumanna. Oddzielnym problemem jest też możliwość resetowania rejestrów, co w przypadku kwantowym ma złożony aspekt uwzględniający m.in. twierdzenie *no-deleting*.

Kryteria DiVincenzo dla realizacji komputera kwantowego

1	odpowiednio zdefiniowany qubit — dwa stany kwantowe oddzielone od pozostałych stanów układu (względnie duże odległości energetyczne, wzbronione przejścia, tak by informacja w niego wpisana nie ulegała wypływowi)
2	określenie możliwości wpisywania informacji w qubit — tj. możliwości uzyskania dowolnej superpozycji dwóch stanów qubitu przy pomocy zewnętrznego, makroskopowo regulowanego pola (np. oscylacje Rabięgo w realistycznym obszarze pól)
3	zaprojektowanie i implementowanie podstawowej operacji dwu-qubitowej, o którą oprzeć by można wykonanie dowolnej kwantowej operacji logicznej (taką bramką może być CNOT lub inna, w każdym przypadku konieczne jest opanowanie techniki włączania i wyłączania oddziaływania qubitów w precyzyjny sposób, w bardzo krótkich odstępach czasu, tj. sterowanie splątaniem dwóch qubitów)
4	zapewnienie stosunku rzędów czasu potrzebnego na wykonanie elementarnych operacji logicznych i czasu dekoherencji na poziomie nie mniejszym niż 6
5	zapewnienie możliwości odczytu informacji na wyjściu
6	zapewnienie możliwości resetowania całego układu

Kryteria DiVincenzo dla realizacji kryptografii kwantowej

1	określenie swobodnego nośnika informacji — mobilnego qubitu (np. fotonu)
2	możliwość utrzymania stabilnych kwantowych cech qubitów mobilnych na dużych odległościach
3	możliwość identyfikacji stanu qubitu (pomiar)

Dodatek B

Kody źródłowe wykorzystanych procedur numerycznych

Niniejszy rozdział zawiera napisane dla środowiska Wolfram Mathematica 7 kody źródłowe wykorzystanych w niniejszej rozprawie wybranych procedur numerycznych do wyznaczania stanów kwantowych ekscytonu metodą Hartree w samouzgodnionym potencjale oraz defazowania orbitalnych stopni swobody w kropkach kwantowych.

B.1 Znajdowanie stanów kwantowych ekscytynu

Uwagi ogólne

Poniższe funkcje zakładają istnienie globalnych definicji następujących stałych :

hh	stała Diraca \hbar [J s]
ee	ładunek elektronu [C]
ϵ_0	przenikalność dielektryczna próżni $[F\ m^{-1}] = [C^2 / (J\ m)]$

Funkcja ExcitonProblem

Zagadnienie własne ekscytynu w potencjale samouzgodnionym w podejściu Hartree.

Wejście:

ue0	goły potencjał wiązacy dla elektronu (lista wartości w punktach siatki x_i),
uh0	goły potencjał wiązacy dla dziury (lista wartości w punktach siatki x_i),
NN	liczba punktów jednorodnej siatki dyskretnej x_i ,
s	krok siatki x_i .
x0	"zerowy" punkt siatki x_i ,
numstates	liczba wyznaczanych w każdym kroku stanów jednocząstkowych,
hartreesteps	liczba kroków hartree (numstates/2 kroków dla każdej cząstki),
ne	numer rozpatrywanego stanu elektronu (główna liczba kwantowa),
nh	numer rozpatrywanego stanu dziury (główna liczba kwantowa),
le	orbitalna liczba kwantowa (z-towa składowa momentu pędu) elektronu,
lh	orbitalna liczba kwantowa (z-towa składowa momentu pędu) dziury,
B	wartość zewnętrznego pola magnetycznego zorientowanego prostopadle do płaszczyzny kropki (w [T]),
me	masa efektywna elektronu [kg],
mh	masa efektywna dziury [kg],
ϵ	względna przenikalność dielektryczna,
$h\omega_0$	jednostka energii (krzywizna wejściowego potencjału gaussowskiego) [J].

Wyjście:

{eigvalse0, psise0, eigvalse, psise, uHe, eigvalsh, psish, uHh, Vc, Eex}

eigvalse0	lista wartości własnych elektronu w zerowym kroku,
psise0	lista funkcji falowych elektronu w zerowym kroku (listy wartości w punktach siatki x_i),
eigvalsh0	lista wartości własnych dziury w zerowym kroku,
psish0	lista funkcji falowych dziury w zerowym kroku (listy wartości w punktach siatki x_i),
eigvalse[[k]]	lista wartości własnych elektronu w k-tym kroku,
psise[[k]]	lista funkcji falowych elektronu w k-tym kroku (listy wartości w punktach siatki x_i),
uHe[[k]]	samouzgodniony potencjał elektronu w k-tym kroku (lista wartości w punktach siatki x_i),
eigvalsh[[k]]	lista wartości własnych dziury w k-tym kroku,
psish[[k]]	lista funkcji falowych dziury w k-tym kroku (listy wartości w punktach siatki x_i),
uHh[[k]]	samouzgodniony potencjał dziury w k-tym kroku (lista wartości w punktach siatki x_i),
Vc	energia oddziaływania Coulomboskiego elektron-dziura,
Eex	energia wiązania ekscytynu

Uwagi:

Wejściowe potencjały ue_0 , uh_0 , wynikowe wartości własne, potencjały i energie w jednostkach bezwymiarowych $h\omega_0$.

Krok siatki x_i (s) i punkt x_0 w jednostkach bezwymiarowych $\lambda_0 = \frac{\hbar}{\sqrt{m_e h\omega_0}}$.

```
ExcitonProblem[ue0_, uh0_, NN_, s_, x0_, numstates_, hartreesteps_,
  ne_, nh_, le_, lh_, B_, me_, mh_, e_, h\omega0_, debug_] := Module[
  {λ0, ωce, ωch, eigvals, psis, uHI, eigvalue0, psise0, eigvalue = {},
  psise = {}, uHe = {}, eigvalsh = {}, psish = {}, uHh = {}, Vc, Eex},

  λ0 =  $\frac{\hbar}{\sqrt{m_e h\omega_0}}$ ;
  ωce = -  $\frac{e e B}{m_e}$ ;
  ωch =  $\frac{e e B}{m_h}$ ;

  If[debug == True,
    Print[Style["Elektron - krok 0", "Subsection"]];];
  {eigvals, psis} = HartreeStepEigenproblem[True,
    ue0, NN, s, x0, numstates, le, ωce, me, mh, h\omega0];
  eigvalue0 = eigvals;
  psise0 = psis;

  Do[
    If[debug == True,
      Print[Style["Dziura - krok " <> ToString[i] <> " z " <>
        ToString[Ceiling[hartreesteps / 2]], "Subsection"]];];
    uHI =  $\frac{1}{h\omega_0} \frac{e e^2}{4 \pi \epsilon \epsilon_0} \frac{1}{\lambda_0} \frac{1}{2 \pi}$  HartreeIntegral[psis[[ne]], NN, s] / 10;
    AppendTo[uHh, uh0 - uHI];
    {eigvals, psis} = HartreeStepEigenproblem[False,
      Last[uHh], NN, s, x0, numstates, lh, ωch, me, mh, h\omega0];
    AppendTo[eigvalsh, eigvals];
    AppendTo[psish, psis];
    If[Mod[hartreesteps, 2] == 0,
      If[debug == True,
        Print[Style["Elektron - krok " <> ToString[i] <> " z " <>
          ToString[Ceiling[hartreesteps / 2]], "Subsection"]];];
      uHI = -  $\frac{1}{h\omega_0} \frac{e e^2}{4 \pi \epsilon \epsilon_0} \frac{1}{\lambda_0} \frac{1}{2 \pi}$  HartreeIntegral[psis[[nh]], NN, s];
      AppendTo[uHe, ue0 + uHI];
      {eigvals, psis} = HartreeStepEigenproblem[True,
        Last[uHe], NN, s, x0, numstates, le, ωce, me, mh, h\omega0];
```

```

AppendTo[eigvalse, eigvals];
AppendTo[psise, psis];
];
, {i, 1, Ceiling[hartreesteps / 2]}];

If[debug == True,
Print[Style[
"Energia oddziaływania Coulombowskiego elektron-dziura",
"Subsection"]];];
Vc = -  $\frac{1}{\hbar\omega_0} \frac{ee^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{\lambda_0} \frac{1}{2\pi}$  CoulombInteractionIntegral [
psise[[1]][[1]], psish[[1]][[1]], NN, s];
Eex = Last[eigvalse][[ne]] + Last[eigvalsh][[nh]] - Vc;

{eigvalse0, psise0, eigvalse,
psise, uHe, eigvalsh, psish, uHh, Vc, Eex}
];

```

Funkcja HartreeStepEigenproblem

Zagadnienie własne w pojedynczym kroku Hartree.

Wejście:

electron	True/False odpowiednio dla elektronu/dziury,
u	aktualny kształt potencjału z poprzedniego kroku Hartree (lista wartości w punktach siatki x_i),
NN	liczba punktów jednorodnej siatki dyskretnej x_i ,
s	krok siatki x_i ,
x0	"zerowy" punkt siatki x_i ,
numstates	liczba szukanych stanów,
l	orbitalna liczba kwantowa (z-towa składowa momentu pędu),
ωc	częstość cyklotronowa cząstki [s^{-1}],
me	masa efektywna elektronu [kg],
mh	masa efektywna dziury [kg],
$\hbar\omega_0$	jednostka energii (krzywizna wejściowego potencjału gaussowskiego) [J].

Wyjście:

{eigvals, psis}	
eigvals	lista znalezionych wartości własnych,
psis	lista znalezionych funkcji falowych odpowiadającym wartościom własnym eigvals (listy wartości w punktach siatki x_i).

Uwagi:

Wejściowy potencjał u i wynikowe wartości własne w jednostkach bezwymiarowych $\hbar\omega_0$.

Krok siatki x_i (s) i punkt x_0 w jednostkach bezwymiarowych $\lambda_0 = \frac{\hbar}{\sqrt{me \hbar\omega_0}}$.


```

HartreeStepEigenproblem[electron_, u_,
  NN_, s_, x0_, numstates_, l_, ωc_, me_, mh_, hω0_] :=
Module[{mmult, uB, eigvals, psis, psi, uHI, uH},
  If[electron == True, mmult = 1, mmult =  $\frac{mh}{me}$ ];
  uB = Table[Module[{xi},
    xi = If[i == 1, x0, 0] + (i - 1) s;
     $\frac{1}{2} \frac{l^2}{xi^2} + \frac{1}{8} mmult^2 \frac{hh^2 \omega c^2}{h\omega 0^2} xi^2 + mmult u[[i]]$ 
  ], {i, 1, NN}] // N;
  {eigvals, psis} =
  SingleParticleEigenProblem[uB, NN, s, x0, numstates];
  eigvals =  $\frac{eigvals}{mmult} - \frac{\omega c}{(h\omega 0 / hh)} \frac{1}{2}$ ;
  {eigvals, psis}
];

```

Funkcja SingleParticleEigenProblem

Wyznaczenie trójdzielnej macierzy symetrycznej dla zagadnienia własnego na niejednorodnej siatce $h_i = \sqrt{s x_i}$.

Wejście:

u	bezwymiarowy potencjał na siatce x_i (lista wartości w punktach siatki).
n	liczba punktów jednorodnej siatki dyskretnej x_i ,
s	krok siatki x_i ,
x0	"zerowy" punkt siatki x_i ,
num	numer rozpatrywanego stanu,

Wyjście:

{eigvals,psis}	
eigvals	lista znalezionych wartości własnych,
psis	lista znalezionych funkcji falowych odpowiadającym wartościom własnym eigvals (listy wartości w punktach siatki x_i).

Uwagi:

Wejściowy potencjał u i wynikowe wartości własne w jednostkach bezwymiarowych $h\omega 0$.

Krok siatki x_i (s) i punkt x_0 w jednostkach bezwymiarowych $\lambda_0 = \frac{\hbar}{\sqrt{me h\omega 0}}$.

```

SingleParticleEigenProblem[u_, n_, s_, x0_, num_] :=
Module[{hi, Md, Me, M, zleft, zright, eigvals, xis, psis, psisgr},
  {hi, Md, Me} = N[EigenProblemNonuniformMatrix[n, s, x0, u]];
  {Md, Me} = s^2 {Md, Me};

```

```

eigvals = Table[EigenValueMD[Md, Me, j, s2 * Min[ui],
  s2 * (4 + Max[ui]), 1 * 10-10], {j, 1, topeigval}];
xis = Table[EigenVectorDWSZ[Md, Me, eigvals[[j]],
  Position[u, Min[u]][[1]][[1]][[1]][[1]], {j, 1, topeigval}];
xis = Table[
  xis[[j]] /
  Sqrt[s / 2 * ((xis[[j]][[1]] / hi[[1]])2 * ((1 - 1) s) +
    Sum[2 * (xis[[j]][[i]] / hi[[i]])2 * ((i - 1) s), {i, 2,
      Length[xis[[j]] - 1} + (Last[xis[[j]] / Last[hi])2 *
      ((Length[xis[[j]] - 1) s))],
  , {j, 1, Length[xis]};

psis = Table[xis[[j]], {j, 1, Length[xis]};
psis = Table[Table[psis[[j]][[i]] / hi[[i]],
  {i, 1, Length[psis[[j]]}], {j, 1, Length[psis]};

{Sort[eigvals][[1 ;; num]] / s2, psis}
];

```

Funkcja EigenProblemNonuniformMatrix

Wyznaczenie trójdzielnej macierzy symetrycznej dla zagadnienia własnego na niejednorodnej siatce $h_i = \sqrt{s x_i}$.

Wejście:

n	liczba punktów jednorodnej siatki dyskretnej x_i ,
s	krok siatki x_i ,
x0	"zerowy" punkt siatki x_i
u0	bezwymiarowy potencjał na siatce x_i (lista wartości w punktach siatki).

Wyjście:

{hi, di, ei}

hi	lista punktów siatki niejednorodnej h_i ,
di	wektor wyrazów diagonalnych trójdzielnej macierzy symetrycznej,
ei	wektor wyrazów pozadiagonalnych trójdzielnej macierzy symetrycznej. (macierz (d_i, e_i) dla zadania własnego na siatce h_i).

Uwagi:

Wejściowy potencjał u0 w jednostkach bezwymiarowych $h\omega_0$.

Krok siatki x_i (s) i punkt x_0 w jednostkach bezwymiarowych $\lambda_0 = \frac{\hbar}{\sqrt{me h\omega_0}}$.

```

EigenProblemNonuniformMatrix[n_, s_, x0_, u0_] :=
Module[{u, xxi, xi, hhi, hi, ei, di, i},
  u[[i_]] := u0[[i + 1]];
  xxi = Table[N[i s / 2], {i, 0, 2 (n - 1) + 2}];
  xi[[i_]] := If[Negative[i], 0, If[i == 0, x0, xxi[[i * 2 + 1]]];

```

```

hhi = Table[N[ $\sqrt{\frac{x_i[i + \frac{1}{2}]^2 - x_i[i - \frac{1}{2}]^2}{2}}$ ], {i, 0, n - 1}];
hi[i_] := hhi[[i + 1]];
ei = Table[N[- $\frac{1}{2} \frac{1}{hi[i] hi[i + 1]} \frac{x_i[i + \frac{1}{2}]}{x_i[i + 1] - x_i[i]}$ ], {i, 0, n - 2}];
di = Table[
  N[ $\frac{1}{2} \frac{1}{hi[i]^2} \left( \frac{x_i[i + \frac{1}{2}]}{x_i[i + 1] - x_i[i]} + \text{If}[i > 0, \frac{x_i[i - \frac{1}{2}]}{x_i[i] - x_i[i - 1]}, 0] \right) +$ 
  u[i]], {i, 0, n - 1}];
{hhi, di, ei}
];

```

Funkcja HartreeIntegral

Wartość całki Hartree - poprawki do samouzgodnionego potencjału cząstki w obecności drugiej cząstki.

Wejście:

psi funkcja falowa drugiej cząstki (lista wartości w punktach siatki x_i).
 NN liczba punktów jednorodnej siatki dyskretnej x_i ,
 s krok siatki x_i .

Wyjście:

Uh wartość całki Hartree.

Uwagi:

Wynikowa całka Hartree w jednostkach bezwymiarowych $\hbar\omega_0$.

Krok siatki x_i (s) w jednostkach bezwymiarowych $\lambda_0 = \frac{\hbar}{\sqrt{me\hbar\omega_0}}$.

```

HartreeIntegral[psi_, NN_, s_] :=
Module[{ $\epsilon$ , K1, K2, a, c,  $\rho$ , G, G1, F, F1, A, C, t, Uh},
   $\epsilon = 10^{-100}$ ;
  K1[x_] := 1.3862944 + 0.1119723 (1 - x) + 0.0725296 (1 - x)^2;
  K2[x_] := -(0.5 + 0.1212478 (1 - x) + 0.0288729 (1 - x)^2);
  a[x_] := 2 x Log[Abs[x +  $\epsilon$ ]] + 2 (s - x) Log[Abs[s - x +  $\epsilon$ ]];
  c[x_] := x (2 s - x) Log[Abs[x +  $\epsilon$ ]] + (s - x)^2 Log[Abs[s - x +  $\epsilon$ ]];
  t = AbsoluteTime[];
  Uh = Monitor[
    Table[
      Sum[

```

```

G = K1 [  $\frac{4 (j - 1) (i - 1)}{(j - 1 + i - 1 + \epsilon)^2}$  ]  $\frac{4 \text{psi}[[i]]^2 (i - 1)}{j - 1 + i - 1 + \epsilon}$ ;
G1 = K1 [  $\frac{4 (j - 1) (i)}{(j - 1 + i)^2}$  ]  $\frac{4 \text{psi}[[i + 1]]^2 (i)}{j - 1 + i}$ ;
F = K2 [  $\frac{4 (j - 1) (i - 1)}{(j - 1 + i - 1 + \epsilon)^2}$  ]  $\frac{4 \text{psi}[[i]]^2 (i - 1)}{j - 1 + i - 1 + \epsilon}$ ;
F1 = K2 [  $\frac{4 (j - 1) (i)}{(j - 1 + i)^2}$  ]  $\frac{4 \text{psi}[[i + 1]]^2 (i)}{j - 1 + i}$ ;
A = a[s - ((j - 1) s - (i - 1) s)] - a[s + ((j - 1) s + (i - 1) s)];
C =  $\frac{1}{s}$  (c[s - ((j - 1) s - (i - 1) s)] - c[s + ((j - 1) s + (i - 1) s)]) -
    2 (j - 1) s;
N [ (G1 + G)  $\frac{s}{2}$  + F A + (F1 - F) C ]
, {i, 1, NN - 1} ]
, {j, 1, NN} ]
, ToString[j] <> "/" <> ToString[NN] <> " (" <>
  ToString[Round[AbsoluteTime[] - t, 0.1]] <> "s) " ]];
Uh
];

```

Funkcja CoulombInteractionIntegral

Wartość całki energii oddziaływania Coulombowskiego pomiędzy elektronem i dziurą.

Wejście:

psie funkcja falowa elektronu (lista wartości w punktach siatki x_i),
 psih funkcja falowa dziury (lista wartości w punktach siatki x_i),
 NN liczba punktów jednorodnej siatki dyskretnej x_i ,
 s krok siatki x_i .

Wyjście:

Vc wartość energii oddziaływania Coulombowskiego.

Uwagi:

Wynikowa energia w jednostkach bezwymiarowych $\hbar\omega_0$.

Krok siatki x_i (s) w jednostkach bezwymiarowych $\lambda_0 = \frac{\hbar}{\sqrt{me \hbar\omega_0}}$.

```

CoulombInteractionIntegral [psie_, psih_, NN_, s_] :=
Module [ {ε, K1, K2, a, c, ρ, G, G1, F, F1, A, C, t, Vcp, Vc},
  ε = 10-100;
  K1 [x_] := 1.3862944 + 0.1119723 (1 - x) + 0.0725296 (1 - x) ^ 2;
  K2 [x_] := - (0.5 + 0.1212478 (1 - x) + 0.0288729 (1 - x) ^ 2);

```

```

a[x_] := 2 x Log[Abs[x + ε]] + 2 (s - x) Log[Abs[s - x + ε]];
c[x_] := x (2 s - x) Log[Abs[x + ε]] + (s - x)^2 Log[Abs[s - x + ε]];
t = AbsoluteTime[];
Vcp = Monitor[
  Table[
    Sum[
      G = K1 [  $\frac{4 (j - 1) (i - 1)}{(j - 1 + i - 1 + \epsilon)^2}$  ]  $\frac{4 \text{psih}[[i]]^2 (i - 1)}{j - 1 + i - 1 + \epsilon}$ ;
      G1 = K1 [  $\frac{4 (j - 1) (i)}{(j - 1 + i)^2}$  ]  $\frac{4 \text{psih}[[i + 1]]^2 (i)}{j - 1 + i}$ ;
      F = K2 [  $\frac{4 (j - 1) (i - 1)}{(j - 1 + i - 1 + \epsilon)^2}$  ]  $\frac{4 \text{psih}[[i]]^2 (i - 1)}{j - 1 + i - 1 + \epsilon}$ ;
      F1 = K2 [  $\frac{4 (j - 1) (i)}{(j - 1 + i)^2}$  ]  $\frac{4 \text{psih}[[i + 1]]^2 (i)}{j - 1 + i}$ ;
      A = a[s - ((j - 1) s - (i - 1) s)] - a[s + ((j - 1) s + (i - 1) s)];
      C =  $\frac{1}{s}$  (c[s - ((j - 1) s - (i - 1) s)] - c[s + ((j - 1) s + (i - 1) s)]) -
        2 (j - 1) s;
      N [ (G1 + G)  $\frac{s}{2}$  + F A + (F1 - F) C ]
      , {i, 1, NN - 1} ]
      , {j, 1, NN} ]
      , ToString[j] <> "/" <> ToString[NN] <> " (" <>
        ToString[Round[AbsoluteTime[] - t, 0.1]] <> "s)";
      Vc = Sum [  $\frac{s}{2}$  (psie[[i]]^2 Vcp[[i]] (i - 1) s +
        psie[[i - 1]]^2 Vcp[[i - 1]] (i - 2) s) , {i, 2, NN} ];
      Vc
    ] ;

```

Funkcja EigenValueMD

Znajdowanie wartości własnej symetrycznej macierzy trójdzielnej metodą Martina-Deana.

Wejście:

Md, Me	wektory wyrazów diagonalnych i pozadiagonalnych hamiltonianu,
j	nr szukanej wartości własnej,
zp, zk	dolna i górna granica przedziału poszukiwania,
sigma	docelowa dokładność.

Wyjście:

ε	szukana j-ta wartość własna.
---	------------------------------

```

EigenValueMD[Md_, Me_, jj_, zp_, zk_, sigma_] :=
Module[{z, u, LL, zpp, zkk, i},
  z = 0;
  zpp = zp;
  zkk = zk;
  While [zkk - zpp > sigma,
    z = (zpp + zkk) / 2;
    u = Md[[0 + 1]] - z;
    If[u < 0, LL = 1, LL = 0];
    For[i = 1, i < Length[Md], i++,
      u = Md[[i + 1]] - z - Me[[i]]^2 / u;
      If[u < 0, LL++];
    ];
    If[LL < jj, zpp = z, zkk = z];
  ];
  z
];

```

Funkcja EigenVectorDWSZ

Znajdowanie funkcji własnej symetrycznej macierzy tójdagonalnej metodą DWSZ.

Wejście:

Md, Me	wektory wyrazów diagonalnych i pozadiagonalnych hamiltonianu,
eigval	wartość własna, dla której szukana jest funkcja własna,
startpoint	punkt startowy algorytmu (indeks) (powinien znajdować się w obszarze studni).

Wyjście:

{psi, err}

psi	znaleziony wektor własny (lista wartości w punktach siatki),
err	błąd (dokładność wyniku).

```

EigenVectorDWSZ[Md_, Me_, eigval_, startpoint_] :=
Module[{psi, n, thetaminus, thetaplus, k, err, i},
  n = Length[Md];
  thetaminus = Table[0, {i, 1, n}];
  thetaplus = thetaminus;
  psi = thetaminus;
  thetaminus[[1]] = 1 / (Md[[1]] - eigval);
  For[i = 2, i < n, i++,
    thetaminus[[i]] =
      1 / (Md[[i]] - eigval - Me[[i - 1]]^2 * thetaminus[[i - 1]]);
  ];
  thetaplus[[n]] = 1 / (Md[[n]] - eigval);
  For[i = n - 1, i > 1, i--,
    thetaplus[[i]] =
      1 / (Md[[i]] - eigval - Me[[i]]^2 * thetaplus[[i + 1]]);
  ];
];

```

```

k = startpoint;
psi[[k]] = 1;
For[i = k + 1, i ≤ n, i++,
  psi[[i]] = -Me[[i - 1]] * thetaplus[[i]] * psi[[i - 1]];
];
For[i = k - 1, i ≥ 1, i--,
  psi[[i]] = -Me[[i]] * thetaminus[[i]] * psi[[i + 1]];
];

k = Ordering[Abs[psi], -1][[1]];
psi[[k]] = 1;
For[i = k + 1, i ≤ n, i++,
  psi[[i]] = -Me[[i - 1]] * thetaplus[[i]] * psi[[i - 1]];
];
For[i = k - 1, i ≥ 1, i--,
  psi[[i]] = -Me[[i]] * thetaminus[[i]] * psi[[i + 1]];
];

err = Abs[Me[[k - 1]] * psi[[k - 1]] +
  (Md[[k]] - eigval) * psi[[k]] + Me[[k]] * psi[[k + 1]]];
{psi, err}
];

```

B.2 Znajdowanie formfaktorów oddziaływania z fononami i funkcji korelacyjnej

Uwagi ogólne

Poniższe funkcje zakładają istnienie globalnych definicji następujących stałych :

hh	stała Diraca \hbar [J s]
ee	ładunek elektronu [C]
ϵ_0	przenikalność dielektryczna próżni [$F m^{-1}$] = [$C^2 / (J m)$]
kb	stała Boltzmana [J/K]

Oznacznia używane w opisach:

$\hbar\Omega$	szczelina dla fononów LO (energia w punkcie Γ),
v	objętość komórki elementarnej,
ee ϵ	efektywna względna przenikalność dielektryczna $(1 / \epsilon_\infty - 1 / \epsilon)^{-1}$,
M	masa jonów w komórce elementarnej,
Ca	prędkość dźwięku w kryształ (prędkość grupowa fononów LA).

Funkcja FormFactorOA

Wartości formfaktorów oddziaływania z fononami LO i LA dla pojedynczego wektora falowego $\mathbf{k} = (k_\rho, k_z)$.

Wejście:

k_ρ	składowa cylindryczna wektora falowego (w płaszczyźnie kropki) [nm^{-1}],
k_z	z-towa składowa wektora falowego (prostopadła do płaszczyzny kropki) [nm^{-1}],
psie	radialna część funkcji falowej elektronu (w płaszczyźnie kropki) - lista punktów $\{\rho$ [nm], $\psi(\rho)\}$,
psih	radialna część funkcji falowej dziury j.w.,
Lz	rozmiar pionowy ekscytonu [nm],
CCo	stała dla fononów LO ($CCo = ee \sqrt{\frac{2 \pi \hbar \Omega}{v 4 \pi ee \epsilon \epsilon_0}}$ [$\frac{J}{m}$]),
CCa	stała dla fononów LA ($CCa = \sqrt{\frac{\hbar h}{2 M Ca}}$ [$m^{1/2}$]),
σ_e	potencjał deformacyjny elektronu [J],
σ_h	potencjał deformacyjny dziury [J].

Wyjście:

{Fo,Fa}

Fo	wartość formfaktora oddziaływania z fononami LO [meV],
Fa	wartość formfaktora oddziaływania z fononami LA [meV].

Uwagi:

Wejściowe funkcje falowe unormowane w 2D we współrzędnych cylindrycznych tzn.

$$\int \psi(\rho)^2 \rho d\rho d\phi = 1.$$

```
FormFactorOA[k $\rho$ _, k $z$ _, psie_, psih_, Lz_, CCo_, CCa_,  $\sigma_e$ _,  $\sigma_h$ _] :=
Module[{FFo, FFa},
  {FFo, FFa} = FormFactorOARadialPartsValues [
    k $\rho$ , psie, psih, CCo, CCa,  $\sigma_e$ ,  $\sigma_h$ ];
  {FormFactorValueFromRadialPart[0, k $\rho$ , k $z$ , FFo, Lz],
   FormFactorValueFromRadialPart[1, k $\rho$ , k $z$ , FFa, Lz]}
];
```


Funkcja FormFactorOARadialPartsValues

Wartości radialnych części formfaktorów oddziaływania z fononami LO i LA dla pojedynczej wartości cylindrycznej składowej wektora falowego k_ρ .

Wejście:

- k_ρ składowa cylindryczna wektora falowego (w płaszczyźnie kropki) [nm^{-1}],
- psie radialna część funkcji falowej elektronu (w płaszczyźnie kropki)
- lista punktów $\{\rho \text{ [nm]}, \psi(\rho)\}$,
- psih radialna część funkcji falowej dziury j.w.,
- CCo stała dla fononów LO ($\text{CCo} = ee \sqrt{\frac{2 \pi \hbar \Omega}{v 4 \pi \epsilon \epsilon_f \epsilon_0}} \left[\frac{\text{J}}{\text{m}} \right]$),
- CCa stała dla fononów LA ($\text{CCa} = \sqrt{\frac{\hbar h}{2 M \text{Ca}}} \left[\text{m}^{1/2} \right]$),
- σe potencjał deformacyjny elektronu [J],
- σh potencjał deformacyjny dziury [J].

Wyjście:

{Fo, Fa}

- F_ρ wartość radialnej części formfaktora oddziaływania z fononami LO [meV],
- $F_\rho a$ wartość radialnej części formfaktora oddziaływania z fononami LA [meV].

Uwagi:

Wejściowe funkcje falowe unormowane w 2D we współrzędnych cylindrycznych tzn.

$$\int \psi(\rho)^2 \rho d\rho d\varphi = 1.$$

Radialne części formfaktorów rozumiane są następująco:

$$F_o(\mathbf{k}) = \frac{1}{k} F_\rho o(k_\rho) \exp\left(-\frac{L_z^2}{4} k_z^2\right)$$

$$F_a(\mathbf{k}) = \sqrt{k} F_\rho a(k_\rho) \exp\left(-\frac{L_z^2}{4} k_z^2\right)$$

Całkowanie realizowane jest na siatce jednorodnej z zastosowaniem reguły Simpsona.

```
FormFactorOARadialPartsValues [kρ_, psie_, psih_, CCo_, CCa_,
  σe_, σh_] := Module[{intvec, Ietable, Ie, Ihtable, Ih},
  intvec = 1 / 3 Join[{1}, Table[(Mod[i - 1, 2] + 1) * 2,
    {i, 2, Length[psie] - 1}], {1}];
  Ietable = Table[psie[[i]][[2]]^2 * BesselJ[0, kρ psie[[i]][[1]]]
    (psie[[i]][[1]]), {i, 1, Length[psie]}];
  Ie = (psie[[2]][[1]] - psie[[1]][[1]])
    Sum[intvec[[i]] Ietable[[i]], {i, 2, Length[Ietable] - 1}];
  Ihtable = Table[pasih[[i]][[2]]^2 * BesselJ[0, kρ psih[[i]][[1]]]
    (psih[[i]][[1]]), {i, 1, Length[pasih]}];
  Ih = (psie[[2]][[1]] - psie[[1]][[1]])
    Sum[intvec[[i]] Ihtable[[i]], {i, 2, Length[Ihtable] - 1}];
  {-CCo (Ie - Ih), -CCa (σe Ie - σh Ih)} / ee / 10-3
];
```

Funkcja FormFactorValueFromRadialPart

Wartość formfaktora oddziaływania z fononami LO lub LA dla pojedynczego wektora falowego $\mathbf{k} = (k_\rho, k_z)$ na podstawie znalezionej numerycznie wartości radialnej części formfaktora w punkcie k_ρ .

Wejście:

- s typ rozpatrywanych fononów (0 - fonony LO, 1 - fonony LA)
- k_ρ składowa cylindryczna wektora falowego (w płaszczyźnie kropki) [nm^{-1}],
- k_z z-towa składowa wektora falowego (prostopadła do płaszczyzny kropki) [nm^{-1}],
- FF_ρ wartość radialnej części formfaktora w rozpatrywanym punkcie k_ρ ,
- Lz rozmiar pionowy ekscytonu [nm].

Wyjście:

- F wartość w [meV] formfaktora oddziaływania z rozpatrywanym typem fononów dla pojedynczego wektora falowego $\mathbf{k} = (k_\rho, k_z)$.

Uwagi:

Radialne części formfaktorów rozumiane są następująco:

$$F_o(\mathbf{k}) = \frac{1}{k} F\rho(k_\rho) \exp\left(-\frac{L_z^2}{4} k_z^2\right)$$

$$F_a(\mathbf{k}) = \sqrt{k} F\rho(k_\rho) \exp\left(-\frac{L_z^2}{4} k_z^2\right)$$

`FormFactorValueFromRadialPart [s_, kρ_, kz_, FFρ_, Lz_] :=`

$$\text{If} \left[s == 0, 10^{-9} \text{ If} \left[k_\rho^2 + k_z^2 == 0, 0, \frac{1}{\sqrt{k_\rho^2 + k_z^2}} \right] \text{FF}_\rho, \right.$$

$$\left. \frac{1}{\sqrt{10^{-9}}} \sqrt{\sqrt{k_\rho^2 + k_z^2} \text{FF}_\rho} \text{Exp} \left[-\frac{L_z^2}{4} k_z^2 \right]; \right.$$

Funkcja FormFactorOARadialPartCurves

Krzywe radialnych części formfaktorów oddziaływania z fononami LO i LA dla ścieżki cylindrycznej składowej wektora falowego k_ρ .

Wejście:

- k_ρ path ścieżka (lista wartości) cylindrycznej składowej wektora falowego k_ρ [nm^{-1}],
- kz z-towa składowa wektora falowego (prostopadła do płaszczyzny kropki) [nm^{-1}],
- psie radialna część funkcji falowej elektronu (w płaszczyźnie kropki) - lista punktów $\{\rho$ [nm], $\psi(\rho)\}$,
- psih radialna część funkcji falowej dziury j.w.,
- CCo stała dla fononów LO ($\text{CCo} = e e \sqrt{\frac{2 \pi \hbar \Omega}{v 4 \pi e e f \epsilon_0}} \left[\frac{\text{J}}{\text{m}} \right]$),
- CCa stała dla fononów LA ($\text{CCa} = \sqrt{\frac{\hbar h}{2 M C a}} \left[\text{m}^{1/2} \right]$),
- σ_e potencjał deformacyjny elektronu [J],
- σ_h potencjał deformacyjny dziury [J].

Wyjście:

{Folist,Falist}

Folist radialna część formfaktora oddziaływania z fononami LO - lista punktów {k [nm⁻¹],
 F [meV]}

Falist radialna część formfaktora oddziaływania z fononami LA - lista punktów {k [nm⁻¹],
 F [meV]}

Uwagi:

Wejściowe funkcje falowe unormowane w 2D we współrzędnych cylindrycznych tzn.

$$\int \psi(\rho)^2 \rho d\rho d\varphi = 1.$$

Radialne części formfaktora rozumiane są następująco:

$$F_o(\mathbf{k}) = \frac{1}{k} F\rho o(k_\rho) \exp\left(-\frac{L_z^2}{4} k_z^2\right)$$

$$F_a(\mathbf{k}) = \sqrt{k} F\rho a(k_\rho) \exp\left(-\frac{L_z^2}{4} k_z^2\right)$$

```
FormFactorOARadialPartCurves [kopath_, psie_, psih_, CCo_,
    CCa_, oe_, oh_] := Module[{c = 0, t = AbsoluteTime[], F, R},
    Transpose[Monitor[Table[
        c++;
        F = FormFactorOARadialPartsValues [
            k, psie, psih, CCo, CCa, oe, oh];
        {{k, F[[1]]}, {k, F[[2]]}}
        , {k, kopath}],
    ToString[c] <> "/" <> ToString[Length[kopath]] <> " (" <>
    ToString[Round[AbsoluteTime[] - t, 0.1]] <> "s) "]]
];
```

Funkcja CorrelationIntegralValue

Wartość całki stojącej w funkcji korelacyjnej dla oddziaływania z fononami LO lub LA w określonym momencie czasu i w zadanej temperaturze.

Wejście:

- t moment czasu, dla którego liczona jest wartość całki [ps],
- T temperatura bezwzględna [K],
- s typ rozpatrywanych fononów (0 - fonony LO, 1 -fonony LA)
- FFρ krzywa radialnej części formfaktora oddziaływania z rozpatrywanym typem fononów - lista punktów {k [nm⁻¹], F [meV]},
- Lz rozmiar pionowy ekscytonu [nm],
- kzmax zakres całkowania po współrzędnej z-towej wektora falowego (-kmax,kmax) [nm⁻¹],
- ħΩ szelina dla fononów LO (energia w punkcie Γ) [J],
- β współczynnik dyspersji fononów LO [J m²],
- Ca prędkość dźwięku w kryształ (prędkość grupowa fononów LA),
- v objętość komórki elementarnej kryształu [m³].

Wyjście:

I obliczona wartość całki.

Uwagi:

Unormowana wartość funkcji korelacyjnej na podstawie wartości całki wynosi:

$$\frac{\text{Abs}[(1+I0)^{-1}+I]}{\text{Abs}[(1+I0)^{-1}+I0]}, \text{ gdzie } I0 - \text{wartość całki dla } t=0.$$

Radialne części formfaktora rozumiane są następująco:

$$F_o(\mathbf{k}) = \frac{1}{k} F\rho(k_\rho) \exp\left(-\frac{L_z^2}{4} k_z^2\right)$$

$$F_a(\mathbf{k}) = \sqrt{k} F\rho(k_\rho) \exp\left(-\frac{L_z^2}{4} k_z^2\right)$$

Całkowanie realizowane jest na siatce jednorodnej z zastosowaniem reguły Simpsona uogólnionej na 2 wymiary.

```
(* funkcja dyspersji: s=0 - fonony LO, s=1 - fonony LA *)
ωDispersion[s_, k_, ħΩ_, β_, Ca_] := If[s == 0, (ħΩ - β k^2) / ħh, Ca k];

(* rozkład Bosego-Einsteina *)
BoseEinsteinDistr[E_, T_] := If[T == 0, 0,  $\frac{1}{\text{Exp}[E / (\text{kB } T)] - 1}$ ];

CorrelationIntegralValue[t_, T_, s_, FFρ_, Lz_, kzmax_,
  ħΩ_, β_, Ca_, v_] := Module[{sk, kplist, intvec, ωk, Nk},
  kplist = Transpose[FFρ][[1]];
  sk = (kplist[[2]] - kplist[[1]]);
  intvec = 1 / 3 Join[{1},
    Table[(Mod[i - 1, 2] + 1) * 2, {i, 2, Length[kplist] - 1}], {1}];
   $\frac{1}{\frac{8 \pi^3}{v}}$  (109)2 2 π 2 sk2 Sum[
    ωk = ωDispersion[s,  $\sqrt{((i - 1) sk)^2 + ((j - 1) sk)^2}$  109, ħΩ, β, Ca];
    Nk = BoseEinsteinDistr[ħh ωk, T];
    intvec[[i]] intvec[[Round[j]]] (i - 1) sk 109
    If[s == 0, (10-9)2 If[ $((i - 1) sk)^2 + ((j - 1) sk)^2 == 0$ ,
      0,  $\frac{1}{((i - 1) sk)^2 + ((j - 1) sk)^2}$ ],
       $\frac{1}{10^{-9}} \sqrt{((i - 1) sk)^2 + ((j - 1) sk)^2}$ ]
    ((FFρ[[i]][[2]] 10-3 ee) / (ħh ωk))2 Exp[- $\frac{Lz^2}{2} ((j - 1) sk)^2$ ]
    ((1 + Nk) Exp[-i ωk t 10-12] + Nk Exp[i ωk t 10-12]),
    {i, 1, Length[kplist]}, {j, 1 + 10-10, Length[kplist]}]
  ];
```

Lista publikacji autora

1. W. Jacak, W. Donderowicz, L. Jacak, *Wstęp do informatyki kwantowej*, e-skrypt, Politechnika Wrocławska, Wrocław (2004)
2. J. Krasnyj, W. Donderowicz, W. Jacak, M. Tytus, *Photoluminescence structure of highly excited quantum dots of type II*, Radiation Measurements, **42**, 683 (2007)
3. J. Krasnyj, M. Tytus, W. Donderowicz, W. Jacak, A. Chuchmała, *Gaussian quantum dots of type II in in-plane electric field*, physica status solidi (a), **204**, No. 6, 1944 (2007)
4. J. Krasnyj, A. Chuchmała, W. Jacak, M. Tytus, W. Donderowicz, *Laser action in electrically driven quantum dot matrix*, physica status solidi (a), **204**, No. 6, 1950 (2007)
5. M. Tytus, J. Krasnyj, W. Jacak, A. Chuchmała, W. Donderowicz, L. Jacak, *Differences between photoluminescence spectra of type-I and type-II quantum dots*, Journal of Physics: Conference series, **104**, 012011 (2008)
6. A. Chuchmała, J. Krasnyj, W. Jacak, M. Tytus, W. Donderowicz, L. Jacak, *Far-infrared laser action from parabolic quantum dots matrix*, Journal of Physics: Conference series, **104**, 012012 (2008)
7. W. Jacak, J. Krasnyj, J. Jacak, A. Chepok, L. Jacak, W. Donderowicz, D. Z. Hu, D. M. Schaadt, *Undamped collective surface plasmon oscillations along metallic nanosphere chains*, Journal of Applied Physics, **108**, 084304 (2010)
8. W. Jacak, W. Donderowicz, L. Jacak, *Introduction to quantum information processing and its practical realisation in quantum dot technology*, e-skrypt, Politechnika Wrocławska (2010)

9. W. Jacak, J. Krasnyj, L. Jacak, W. Donderowicz, *Dephasing of QD exciton orbital and spin states due to hybridization with bulk collective excitations*, International Journal of Modern Physics B 25, **10**, 1359 (2011)
10. W. Jacak, J. Krasnyj, J. Jacak, W. Donderowicz, L. Jacak, *Mechanism of plasmon-mediated enhancement of PV efficiency*, Journal of Physics D: Applied Physics, **44**, 055301 (2011)
11. M. Tytus, W. Donderowicz, L. Jacak, *Exciton bound by distant ionized donor in two-dimensional quantum well*, Appl. Phys. Lett. 2011 (w redakcji), arXiv:1111.2158 (2011)
12. M. Tytus, W. Donderowicz, L. Jacak, *On two-dimensional exciton bound by distant ionized-donor in a narrow quantum well*, Phys. Lett. A (w redakcji), arXiv:1111.2518 (2011)
13. W. Jacak, W. Donderowicz, L. Jacak, *Introduction to quantum information processing and communication*, ISBN 978-83-62098-91-0, Printpap (2011)
14. W. Jacak, W. Donderowicz, J. Jacak, L. Jacak, *Wstęp do informatyki i kryptografii kwantowej*, ISBN 978-83-7493-604-0, Oficyna Wydawnicza PWr (2011)

Kopie publikacji autora

Kopie publikacji autora dołączone zostały jako osobny dodatek do niniejszej rozprawy.