Witold A. Jacak, Jurij Krasnyj, Lucjan Jacak, Ryszard Gonczarek

# Dekoherencja orbitalnych i spinowych stopni swobody w kropkach kwantowych



Oficyna Wydawnicza Politechniki Wrocławskiej Wrocław 2009

#### Praca zrealizowana przy współpracy Laboratorium Fizycznych Podstaw Przetwarzania Informacji i wsparciu Stypendium FNP Start (W.J.)

#### *Recenzenci* Marek KUŚ Jan MISIEWICZ

*Opracowanie redakcyjne* Agnieszka ŚCIEPURO

> Korekta Alina KACZAK

Projekt okładki Zofia i Dariusz GODLEWSCY

Wszelkie prawa zastrzeżone. Opracowanie w całości ani we fragmentach nie może być powielane ani rozpowszechniane za pomocą urządzeń elektronicznych, mechanicznych, kopiujących, nagrywających i innych bez pisemnej zgody posiadacza praw autorskich.

© Copyright by Oficyna Wydawnicza Politechniki Wrocławskiej, Wrocław 2009

#### ISBN 978-83-7493-461-9

Oficyna Wydawnicza Politechniki Wrocławskiej Wybrzeże Wyspiańskiego 27, 53-370 Wrocław http://www.oficyna.pwr.wroc.pl oficwyd@pwr.wroc.pl

Drukarnia Oficyny Wydawniczej Politechniki Wrocławskiej. Zam. nr 487/2009

### Spis treści

Wprowa	adzenie		5			
Deko	herencja	a układów kwantowych — wypływ informacji kwantowej $\ \ .\ .\ .$	9			
Rozdzia	ał 1. De	koherencja fazowa orbitalnych stopni swobody w nanostrukturach .	13			
1.1.	.1. Fononowe defazowanie zlokalizowanego ekscytonu w kropce kwantowej 1					
1.2. Uzasadnienie uniwersalnej metody oszacowania czasu defazowania						
	zowanych wzbudzeń w nanostrukturach	32				
1.3.	zrost oddziaływania ładunkowych stopni swobody z fononami LO					
	w nano	strukturach	34			
1.4.	Czasow	$v\!e$ ograniczenie spinowej blokady Pauliego przez defazowanie fononowe	40			
Rozdzia	ał 2. De	koherencja spinowych stopni swobody w kropkach kwantowych	43			
2.1.	Modelowy opis półprzewodnika półmagnetycznego (DMS) — fale spinowe					
	2.1.1.	Uśrednienie po przypadkowych rozkładach domieszek				
		magnetycznych i akceptorów w DMS	50			
	2.1.2.	Metoda uśredniania po losowych rozkładach domieszek	54			
	2.1.3.	Zastosowanie schematu uśrednienia do domieszek magnetycznych				
		i akceptorów w DMS	55			
	2.1.4.	Diagonalizacja efektywnego spinowego hamiltonianu dla DMS —				
		fale spinowe	59			
	2.1.5.	Wpływ binarnych korelacji w rozkładach domieszek w DMS	61			
	2.1.6.	Niskotemperaturowe zachowanie DMS — wpływ fal spinowych	63			
2.2.	Dekoherencja spinu ekscytonu w kropce kwantowej otoczonej materiałem					
	DMS		66			
	2.2.1.	lemperaturowa zaleznosc energetycznego przesunięcia ekscytonu	66			
	0 0 0	Ziokanzowanego w kropce kwantowej zanurzonej w materiale DMS	00			
	2.2.2.	spinowa w otaczającym kropka DMS	68			
2.3.	Mikros	kopowy opis defazowania spinu w kropce kwantowej	08			
	w magi	w magnetycznym otoczeniu				
	2.3.1.	Oddziaływanie wymienne domieszki w DMS z ekscytonem w kropce	73			
	2.3.2.	Hamiltonian fal spinowych w DMS	75			
	2.3.3.	Obraz fal spinowych dla magnetycznego podukładu w DMS $\ldots$	79			
	2.3.4.	Ubieranie ekscytonu w kropce w magnony z DMS — hamiltonian				
		s-d	80			

2.4.	Obliczanie operatora masowego i jego urojonej części dla wielokątnych wierzchołków		
	2.4.1.	Operator masowy w najniższym przybliżeniu dla wielokatnych	00
		wierzchołków	85
	2.4.2.	Urojona cześć operatora masowego	88
	2.4.3.	Różnica pomiedzy defazowaniem ekscytonu w kropce kwantowej	
		przez magnony i fonony	91
	2.4.4.	Rzeczywista poprawka do operatora masowego	92
2.5.	Model	bramki kwantowej singlet-tryplet na kropkach typu He	93
Podsun	nowanie	i wnioski	97
Dodate	k . Eler	nenty kwantowego przetwarzania informacji	103
А.	Porówi	nanie informacji klasycznej i kwantowej	103
	A.1.	Informacja kwantowa i jej opis	105
	A.2.	Macierz gęstości — stan informatyczny układu (qubitu)	107
	A.3.	Reprezentacja Schmidta i stany splątane	110
	A.4.	Pomiar w sensie von Neumanna — superwybór Żurka	112
	A.5.	Geometryczne własności macierzy gęstości — informacji kwantowej	117
	A.6.	Geometria qubitu — zbiór wypukły macierzy gęstości qubitu	
		(sfera Blocha)	118
	A.7.	Stany Bella	119
	A.8.	Protokoły kwantowe	120
	A.9.	No-cloning, no-broadcasting, no-deleting dla informacji kwantowej .	124
	A.10.	Ograniczenia kwantowego przetwarzania informacji	124
В.	Oscyla	cje Rabiego	129
Bibliog	rafia .		133

### Wprowadzenie

Gwałtowny rozwój informatyki w ostatnich dziesiecioleciach objał niemal wszystkie dziedziny od komunikacji i administracji, po gospodarkę, naukę i technologie. Obserwowany stały wykładniczy wzrost możliwości obliczeniowych kolejnych generacji układów scalonych klasycznej informatyki (ujmowany przez tzw. prawo Moore'a<sup>1</sup>) wiąże się z coraz większą skala miniaturyzacji elementów procesorów i układów pamieci. W naturalny sposób działania te sa jednak ograniczone przez atomowa strukturę materiałów i kwantowe zjawiska pojawiające się w nanometrowej skali, które zastępują makroskopowe efekty elektroniczne wykorzystywane do przetwarzania klasycznej informacji. W celu przełamania tych ograniczeń i zapewnienia dalszego dynamicznego wzrostu szybkości i efektywności systemów informatycznych, rozważa sie obecnie możliwości kwantowego przetwarzania informacji, w sposób odmienny od klasycznego. Każda informacja — klasyczna i kwantowa jest fizyczna w sensie swojego nośnika. Informacja klasyczna wiaże sie z fizycznym klasycznym obiektem i jego klasycznym pomiarem — powtarzalnym i nieniszczącym. Informacja kwantowa to zawartość fizyczna stanu układu kwantowego, niedostępna w całości dla obserwatora i tylko cześciowo dla niego osiagalna w wyniku pomiaru układu kwantowego — niepowtarzalnego i niszczącego (Dodatek A). Informacja kwantowa utożsamiana jest ze stanem kwantowym nośnika (układu kwantowego, w najprostszym przypadku qubitu, czyli stanu z dwuwymiarowej, najmniejszej możliwej przestrzeni Hilberta) zarówno w jego stanie czystym opisanym kwantowa funkcja falowa, jak i w stanie mieszanym opisanym macierza gestości.

Idea wykorzystania ewolucji kwantowej do przetwarzania informacji wiąże się z możliwością deterministycznego sterowania układem kwantowym w celu realizacji zaprojektowanego wcześniej kwantowego algorytmu. Taka deterministyczna ewolucja, nazywana też unitarną lub koherentną, wymaga jednak idealnego odizolowania układu kwantowego. Tymczasem żaden układ kwantowy nie może zostać idealnie odizolowany od otoczenia. Układ kwantowy jest bardzo wrażliwy na najmniejsze nawet wpływy tego otoczenia. W rezultacie zaburzana jest

 $<sup>^1</sup>$ G. Moore — jeden z założycieli firmy Intel; według jego obserwacji moc obliczeniowa komputerów podwaja się co 24 miesiące.

unitarna, koherentna ewolucja, a informacja kwantowa wypływa do otoczenia w niekontrolowany i nieodwracalny sposób, niwecząc realizację zaplanowanych kwantowych algorytmów. Pomimo wielkiej przewagi kwantowego przetwarzania informacji (związanej z eksponencjalnym wzrostem wymiaru przestrzeni Hilberta wraz z liczbą qubitów i wynikającym stąd ultraszybkim, klasycznie niedostępnym, równoległym przetwarzaniem informacji kwantowej) praktyczne realizacje skalowalnego komputera kwantowego napotykają poważne ograniczenia natury dekoherencyjnej. Poznanie procesów dekoherencji w układach kwantowych, rozpatrywanych jako perspektywiczne do praktycznej realizacji qubitów i bramek kwantowych, jest zatem jednym z najważniejszych aspektów informatyki kwantowej.

Dekoherencja stanu kwantowego odbywać się może dwoma kanałami — poprzez relaksację, czyli zanik stanu kwantowego, oraz poprzez defazowanie — zmianę stosunków fazowych w kwantowym opisie stanu. Relaksacja, czyli dekoherencja amplitudowa może być opisana znikaniem diagonalnych elementów macierzowych macierzy gęstości stanu kwantowego, podczas gdy defazowanie (dekoherencja fazowa) wiąże się ze znikaniem niediagonalnych elementów macierzy gęstości<sup>2</sup>. Oba typy dekoherencji następują w wyniku oddziaływania z otoczeniem i są z reguły tym istotniejsze, im silniejsze jest to oddziaływanie. Szczególnie złożonym efektem jest dekoherencja fazowa, której kinetyka wydaje się w największym stopniu ograniczać możliwości budowy komputera kwantowego we wszystkich rozważanych obecnie technologiach. To powszechne zjawisko defazowania wiąże się z hybrydyzacją stanu qubitu lub układu qubitów ze stanami otoczenia.

W technologii ciałostałowej — postrzeganej jako bardzo perspektywiczna do praktycznych realizacji kwantowego przetwarzania informacji<sup>3</sup> procesy dekoherencji fazowej są wyjątkowo silne i niekorzystnie ulokowane czasowo w stosunku do wymagań koniecznych do skalowania bramek kwantowych, w celu kwantowej korekty błędów (tzw. kryteria DiVincenzo — Dodatek A). Zarówno ładunkowe, jak i spinowe stopnie swobody stanów kwantowych w fazie ciałostałowej — charakteryzujące stany w kropkach kwantowych — podlegają defazowaniu przez otoczenie (chociaż należy podkreślić, że spinowe stopnie swobody wydają się być bardziej odporne na dekoherencję niż orbitalne stopnie swobody, ponieważ nie ulegają bezpośredniemu dekoherencyjnemu wpływowi fononów z otoczenia, ale z kolei mogą być sterowane tylko na znacznie dłuższych skalach czasowych w porównaniu do orbitalnych stopni swobody, także z uwagi na słabsze oddziaływanie ze spinami).

 $<sup>^2\,</sup>$  Opis stanu kwantowego za pomocą macierzy gęstości można zastosować zarówno do stanów czystych, jak i mieszanych — Dodatek A.

 $<sup>^3</sup>$ Z powodu zaawansowania rozmaitych technologii wytwarzania ciałostałowych struktur kwantowych (głównie tzw. kropek kwantowych) i opanowania technik sterowania stanami kwantowymi w tych strukturach.

Tematem przestawionego opracowania jest analiza dekoherencji, głównie fazowej ładunkowych (orbitalnych) i spinowych stopni swobody wzbudzeń zlokalizowanych w kropkach kwantowych, w celu rozpoznania ograniczeń i możliwości na drodze do praktycznej realizacji kwantowego przetwarzania informacji i także innych zastosowań koherentnego sterowania (nanotechnologicznych i spintronicznych) w technologii kropek kwantowych.

Kropki kwantowe [1–3] to nazwa obejmująca rozmaite struktury nanometrowych rozmiarów, sztucznie wykonywane różnymi technikami prowadzącymi do przestrzennego ograniczenia dynamiki nośników (elektronów i dziur), a także wzbudzeń par elektronowo-dziurowych — ekscytonów, we wszystkich trzech wymiarach (ograniczenie tej dynamiki do nanometrowych rozmiarów w jednym wymiarze prowadzi do tzw. studni kwantowych, w dwóch do drutów kwantowych). Nanometrowa skala ograniczenia dynamiki powoduje kwantowanie energii kinetycznej<sup>4</sup> w skali rzędu meV:

$$\Delta E \ge \frac{(\Delta p)^2}{2m^*} \simeq \frac{\hbar^2}{2m^* d^2} \simeq \begin{cases} 10 \text{ meV}, \ d \sim 10 \text{ nm}, \\ 1 \text{ eV}, \ d \sim 0.1 \text{ nm}. \end{cases}$$
(1)

W przypadku kropek kwantowych energia kwantowania lokuje się w obszarze łatwo dostępnym do sterowania zewnętrznymi polami (elektrycznym i magnetycznym), w przeciwieństwie do zwykłych atomów (w przypadku atomów sterowanie stanami kwantowymi za pomocą zewnętrznych pól wymaga stosowania natężeń poza technicznymi możliwościami). Ta zaleta kropek kwantowych, w połączeniu z rozmaitością technik wytwarzania, dużą elastycznością parametrów, możliwością wiązania różnych nośników, a nawet tworzenia lub modyfikowania kropek za pomocą pól zewnętrznych, decyduje o dużych pespektywach ich zastosowania w nowych rozwiązaniach nanotechnologii i spintroniki.

Kropki kwantowe wytwarzać można z różnych materiałów — głównie z półprzewodników, chociaż nanocząstki izolatorowe lub metaliczne także są wykonywane wieloma metodami (ciecz kolektywnych elektronów w nanocząstkach metalicznych prowadzi jednak do zupełnie odmiennych własności fizycznych takich struktur w porównaniu do półprzewodnikowych kropek kwantowych i dlatego w odniesieniu do metalicznych nanostruktur nie używa się nazwy kropki kwantowe). Do zastosowań optoelektronicznych najistotniejsze wydają się kropki półprzewodnikowe, dodatkowo lokowane w innych nanostrukturach (np. w studniach kwantowych), ze względu na dobrze opanowane i bogate możliwości sterowania

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> Energia kulombowska skaluje się jak 1/d (i jest też rzędu meV dla kropek kwantowych), natomiast kinetyczna jak  $1/d^2$ , stąd wynikają inne własności powłokowe kropek niż zwykłych atomów (bardziej skomplikowane reguły typy Hunda), gdyż obie energie są do siebie w stosunku d, co faworyzuje energię kulombowską w przypadku kropek, w przeciwieństwie do atomów [1].

w takich układach. Półprzewodnikowe kropki kwantowe mogą być wytwarzane technikami wytrawiania chemicznego, po uprzednim litograficznym naświetlaniu wzoru wiązką jonową lub elektronową o dostatecznie wysokiej rozdzielczości (zwykła optyczna litografia o rozdzielczości do 200–300 nm jest tutaj nie wystarczająca) lub technikami samoorganizacji (metoda Stranskiego–Krastanowa, polegająca na nakładaniu warstw epitaksjalnych — MBE, *Molecular Beam Epitaxy*, lub osadzania warstw z roztworu — techniką MOCVD, *Metal Organic Chemical Vapor Deposition*, o różnych stałych sieciowych, co prowadzi do samorzutnego powstawania nanokryształów na tzw. warstwie zwilżającej), czy też za pomocą ogniskowania elektrycznego w studni kwantowej [1, 5, 6]. Ta ostatnia technika, wciąż jeszcze nie w pełni rozwinięta (z uwagi na trudności z uzyskaniem dostatecznie precyzyjnych elektrod), wydaje się być bardzo perspektywiczna, gdyż oferuje największą dostępną elastyczność parametrów kropek, a także pozwala na włączanie/wyłączanie kropek w czasie działania ewentualnych przyrządów zbudowanych przy ich wykorzystaniu [1, 4–6].

Do zastosowań nanotechnologicznych i spintronicznych (dotyczy to zwłaszcza tzw. urządzeń jednoelektronowych i jednofotonowych) i do ewentualnego kwantowego przetwarzania informacji istotna jest możliwość sterowania stanami kwantowymi nośników w kropkach, czyli koherentnej (deterministycznej, kontrolowalnej) ich ewolucji czasowej. Warunkiem takiej koherentnej (unitarnej) ewolucji jest brak dekoherencji lub jej minimalizacja, przynajmniej w przedziałach czasowych realizacji sterowania. Dekoherencja jednak jest nieunikniona ze względu na niemożność idealnej izolacji kropki kwantowej od otoczenia. Na podkreślenie zasługuje tu fakt, że w przypadku nanostruktur ciałostałowych, w tym kropek kwantowych, pojawia się zupełnie nowa klasa zjawisk fizycznych w zakresie dekoherencji i relaksacji, odmienna od analogicznych procesów w układach litych (bulk) lub w fizyce atomowej. Jest to spowodowane charakterystyczna dla nanostruktur skala energetyczna, zbliżona do typowych energetycznych parametrów wzbudzeń kolektywnych kryształu (energetyczne charakterystyki pasmowe fononów akustycznych i optycznych). Ta zbieżność skal energii prowadzi do sytuacji rezonansowej — odmiennej od tej w fizyce atomowej, gdzie skala energii wiazania w atomach jest o 3 rzędy wieksza od energii wzbudzeń kolektywnych kryształu i stąd wpływ fononów na stany atomowe jest słaby (ujmowany jako niewielkie zaburzenie). Specyficzne efekty dekoherencyjne kropek kwantowych wynikaja z silnego (rezonansowego) sprzężenia uwięzionych w nich nośników z morzem fononów rozmaitych typów (a także z innymi kolektywnymi wzbudzeniami lub z lokalnymi stopniami swobody, np. domieszek) i dają podstawy do stwierdzenia, że często używane w odniesieniu do kropek określenie 'sztuczne atomy' jest powierzchowne i mylące.

Z tych samych powodów zbyt dokładne modelowanie kropek kwantowych, bez uwzględnienia wpływu kolektywnych stopni swobody otoczenia, może prowadzić do błędnych wniosków, gdyż silne zmiany poziomów energetycznych wywołane hybrydyzacyjnymi (dekoherencyjnymi) efektami, w wyniku wpływu otoczenia, osiągają poziom nawet 10%, co ogranicza wiarygodność modelowania przy zaniedbaniu tych efektów. Rozpoznanie złożonych efektów dekoherencji i relaksacji ładunku i spinu nośników w kropkach kwantowych, istotnie różnych niż w przypadku litych materiałów i atomów, stanowi obecnie bardzo ważny aspekt fizyki nanostruktur.

## Dekoherencja układów kwantowych — wypływ informacji kwantowej

Teoretyczne wyidealizowane rozważania z zakresu informatyki kwantowej [7–13] pomijają zwykle podstawowy fakt towarzyszący kwantowej ewolucji, a mianowicie nieuniknioną dekoherencję. Terminem koherentnej ewolucji określamy idealną dynamikę kwantowego układu odizolowanego, opisanego hamiltonianem i równaniem Heisenberga–Shrödingera:

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\Psi(t)\rangle.$$
<sup>(2)</sup>

To równanie różniczkowe wyznacza jednoznaczną trajektorię w przestrzeni Hilberta do momentu wykonania pomiaru (następuje wtedy przypadkowy kolaps stanu według schematu von Neumanna) (Dodatek A). Warunek unormowania funkcji falowej (zachowania liczby cząstek, w najprostszym przypadku jednej cząstki) prowadzi do hermitowskości operatora Hamiltona i w związku z tym do unitarności operatora ewolucji:

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

Taka postać unitarnego operatora ewolucji słuszna dla hamiltonianu niezależnego od czasu może być łatwo uogólniona na przypadek hamiltonianu zależnego od czasu<sup>5</sup>. W przypadku hamiltonianu zależnego od czasu otrzymujemy w wyniku złożenia operator w postaci  $Te^{\int H(t)dt}$ , gdzie T jest operatorem chronologizacji [15, 16]. W każdym przypadku idealna ewolucja odizolowanego układu

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup> Gdy hamiltonian zależy jawnie od czasu, można opisać ewolucję za pomocą złożenia (scałkowania) unitarnych operatorów ewolucji w czasie dt; zgodnie z równaniem Schrödingera,  $|\Psi(t+dt)\rangle = (1 - \frac{i}{\hbar}\hat{H}(t)dt)|\Psi(t)\rangle$ , czyli  $|\Psi(t+dt)\rangle = \hat{U}(t,dt)|\Psi(t)\rangle$ , gdzie  $\hat{U}(t,dt) = 1 - \frac{i}{\hbar}\hat{H}(t)dt$ ,  $\hat{U}^+\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^+ = 1$  (z dokładnością do liniowych członów względem dt).

kwantowego jest unitarna — mówimy wtedy o koherentnej ewolucji. I taka ewolucja jest zakładana w przypadku wyidealizowanych kwantowo-informatycznych schematów (np. kwantowych algorytmów — Dodatek A).

W realnych fizycznych sytuacjach nigdy nie mamy do czynienia z odizolowanymi układami kwantowymi i zawsze istnieje oddziaływanie z otoczeniem. Nawet gdy jest ono niewielkie, wówczas prowadzi do zaburzenia koherentnej ewolucji, czyli prowadzi do dekoherencji. Ewolucja układu będzie zależała wtedy też od ewolucji otoczenia, w stopniu proporcjonalnym do wielkości oddziaływania układu z otoczeniem. Niekoherentna zatem ewolucja wymyka się determinizmowi koniecznemu do realizacji jakiegokolwiek informatycznego algorytmu kwantowego. Dekoherencja jest tu powodem utraty kontroli nad przetwarzaniem informacji kwantowej, co można określić jako niekontrolowany jej wypływ do otoczenia. Stopień dekoherencji można mierzyć rozmaitymi metodami (m.in. oceniając entropię von Neumanna lub posługując się prostszym pojęciem ufności — *fidelity*, określonym za pomocą iloczynu skalarnego funkcji falowej układu w różnych momentach czasu) [9–14].

Można tu zauważyć, że w klasycznej informatyce każdy nośnik informacji także podlegał zaburzeniom ze strony otoczenia, ale wobec makroskopowego stanu odpowiadającego bitowi niewielkie zmiany nie powodowały zmiany dyskretnej wartości bitu. Inaczej jest w informatyce kwantowej — stan qubitu odpowiada funkcji falowej (macierzy gęstości, w ogólnym przypadku) [9–13] i wobec tego nawet niewielkie zaburzenie powoduje istotne jego zmiany i utratę informacji zawartej w qubicie.

W celu zapewnienia niezawodności przetwarzania informacji stosuje się metody korekty błędów. W przypadku klasycznym, dla zapewnienia wysokiej niezawodności systemów informatycznych, wprowadza się metodę zwielokrotniania zapisu bitu. Błędy przy przetwarzaniu klasycznej informacji zjawiają się losowo i pojedynczo, zatem przy dostatecznie wysokim stopniu zwielokrotnienia (*redundancji*) i częstości weryfikowania całego rejestru (w celu wykrycia i korekty mniejszościowych pomyłek) można osiągnąć dowolnie wysoki poziom ufności.

W przypadku qubitów nie można zastosować bezpośrednio takiej metody prostego zwielokrotnienia z uwagi na ograniczenia *no-cloning* [9–13] (Dodatek A). Można jednak poszukiwać innych metod kwantowej korekty błędów. Wiążą się one z większą odpornością wieloqubitowych stanów typu singlet na dekoherencję. Stany takie, symetryzowane po całej bazie obliczeniowej qubitu:  $|0 >_a \otimes |1 >_b >$  $-|1 >_a \otimes |0 >_b >$ , zawierają w sobie równocześnie 'prawdę i nieprawdę' (na wektorach bazowych) i przez to są inwariantne na dekoherencję (ale tylko typu jednakowo działającą na oba qubity, co wcale nie jest regułą) [14]. Taka metoda lokowania informacji kwantowej w inwariantnych podprzestrzeniach badziej złożonych przestrzeni Hilberta, rozpinanych na uogólnieniach stanów singletowych, choć skuteczna, prowadzi sama do wzrostu dekoherencji, wobec koniecznego wzrostu liczby qubitów (stany typu singlet mogą być realizowane na co najmniej 2 qubitach). Wzrost liczby oddziałujących qubitów nieodwołalnie powoduje eksponencjalny wzrost dekoherencji wraz z liczbą qubitów (~ $e^N$ dla niezależnej dekoherencji N qubitów, ~ $e^{N^2}$ dla jednakowej dekoherencji qubitów właściwej dla rozważanego schematu korekty) [14]. Rozwijane w ten sposób algorytmy kwantowej korekty wymagają zatem zwielokrotnienia uładu — bramki kwantowej, by mogła być ona niezawodna<sup>6</sup>.

Zwielokrotnienie układu na potrzeby kwantowej korekty błedów i zwiazanego z tym zwiekszenia poziomu dekoherencji wymaga założenia, że dla praktycznej implementacji niezawodnej (z korekta błedów) bramki uniwersalnej komputera kwantowego niezbędne sa co najmniej o 6 rzędów wielkości szybsze operacje jednoi dwuqubitowe, niż charakterystyczny czas dekoherencji pojedynczego qubitu. Sa to tzw. kryteria DiVincenzo [7, 8, 20–22] (Dodatek A) i spełnienie ich okazuje się najpoważniejszym wyzwaniem informatyki kwantowej. Jak dotad nie znaleziono odpowiedniego układu kwantowego (implementacji qubitu), który by spełnił to kryterium. Istniejące trzyqubitowe komputery kwantowe (na spułapkowanych jonach i w technice NMR, Dodatek A) [14] są dalekie od spełniania kryterium DiVincenzo i dlatego nie mogą być skalowane do dużego komputera kwantowego (1000 lub nawet 10–100 qubitowego). Poszukiwania odpowiedniego układu prowadzone sa intensywnie, zwłaszcza w obrebie technologii ciałostałowej, w której można byłoby implementować niezbedne procedury wejścia i wyjścia (pomiaru informacji kwantowej, tzn. jej konwersji na zrozumiała informacje klasyczna). Wielką uwagę w tym względzie skupiają obiekty nanometrowych rozmiarów, gdyż w tvm obszarze lokalizacji skala energetyczna, wyrażająca się w takim przypadku przez meV, dopuszcza sterowanie w dostępnym technicznie zakresie pól elektrycznego i magnetycznego (dla atomów skala eV wynikająca z 0,5 nm lokalizacji czyni je mało podatnymi na sterowanie zewnętrzne). Uzyskiwane sztucznie obiekty nanometrowych rozmiarów, kropki kwantowe, znajduja się zatem w cetrum uwagi dla implementacji informatyki kwantowej i ogólniej inżynierii kwantowej.

W kolejnych rozdziałach przedstawimy analizę dekoherencji fazowej orbitalnych (ładunkowych) i spinowych (magnetycznych) stopni swobody kropek kwantowych i ocenimy ich perspektywy do zastosowań w praktycznych realizacjach kwantowych algorytmów.

<sup>&</sup>lt;sup>6</sup> Inne metody kwantowej korekty błędów to, np. szybkie wyteleportowanie (Dodatek A) informacji (stanu) do lepiej izolowanych części układu, a także zastosowanie topologicznych, i przez to globalnych, stopni swobody układów hallowskich (anyony i złożone fermiony [17–19]), jako nośników informacji kwantowej odpornych na dekoherencję, która ma charakter lokalny.

#### Rozdział 1

### Dekoherencja fazowa orbitalnych stopni swobody w nanostrukturach

Orbitalne stopnie swobody odnosza sie do wzbudzeń o charakterze ładunkowym — elektronów, dziur, ekscytonów (tj. par elektronowo-dziurowych), które występują w materiałach fazy skondensowanej. Wzbudzenia te szczególnie dobrze poznane sa w strukturach półprzewodnikowych (ze względu na zaawansowana technologie półprzewodnikowych układów, m.in. silnej integracji używanych w klasycznej informatyce). Wzbudzenia te oddziałują z polem elektrycznym fali elektromagnetycznej (ze względu na ładunek elektryczny) i moga być sterowane metodami optyki kwantowej (dodatek B). Wzbudzenia ładunkowe moga być lokalizowane w nanometrowych sztucznych układach umieszczonych w heterostrukturach półprzewodnikowych, kropkach kwantowych. Szczególnie przydatne wydają sie tu ekscytony, które moga być precyzyjnie sterowane fala elektromagnetyczna, światłem z obszaru widzialnego (lub bliskiej podczerwieni), dla typowej wartości przerwy energetycznej oddzielającej stany elektronów i dziur w półprzewodnikach (przykładowym materiałem jest tu GaAs, a kropki to np. samorosnace struktury typu GaAs/InAs). Poprzez dobranie energii fotonów światła do energii ekscytonu można wzbudzać stan ekscytonowy w reżimie tzw. oscylacji Rabiego (dodatek B), pozwalających na dokładny wybór superpozycji qubitu ładunkowego (qubit może być rozpiety np. na stanach: |1 > -- brak ekscytonu w kropce kwantowej,  $|2\rangle$  — jeden ekscyton w kropce). Techniki otrzymywania ultrakrótkich impulsów laserowych (nawet do skali femtosekund) oraz stosowanie wysokich nateżeń wiazki, pozwalających na bardzo szybkie oscylacje Rabiego [23], wzbudziły wielkie zainteresowanie ze strony informatyki kwantowej, gdyż czasy życia ekscytonów w kropkach osiagaja poziom nanosekund (jak wydawało się zatem, można by uzyskać 6 rzędów wielkości między czasami sterowania a dekoherencją amplitudową, wymaganych przez kryteria DiVincenzo [7, 8, 14, 20–22]).

Tymczasem uwzględnienie nieusuwalnego oddziaływania ekscytonów (elektronów) w kropkach kwantowych z fononami otaczającego kryształu diametralnie zmienia tę korzystną pozornie sytuację. Fonony to kwanty drgań sieci krystalicznej — fonony akustyczne wiążą się z drganiami typu dźwiękowego (wychylenia atomów komórki elementarnej kryształu w tę samą stronę), oraz fonony optyczne (wychylenia różnoimiennych jonów w komórce elementarnej w przeciwne strony — wzbudzane są światłem w kryształach jonowych, stąd ich nazwa). Obydwa typy fononów mogą oddziaływać z ładunkowymi stopniami swobody w kropkach kwantowych. Fonony mogą być spolaryzowane poprzecznie lub podłużnie, ale za najważniejszy wkład w oddziaływanie z elektronami/ekscytonami odpowiadają mody podłużne [26] (LO i LA, odpowiednio dla fononów optycznych i akustycznych).

W materiałach polarnych (np. GaAs jest słabo polarnym półprzewodnikiem) dominujace jest oddziaływanie z fononami LO. Wyraża sie ono poprzez bezwymiarowa stała Fröhlicha. Wieksza wartość tej stałej oznacza silniejsze oddziaływania ładunków z fononami LO. Dla półprzewodnika GaAs 3D (bulk) wartość tej stałej wynosi około 0.06, tymczasem w kropkach kwantowych GaAs/InAs dane z obserwacji eksperymentalnych (pochłaniania podczerwieni w polu magnetycznym i poszerzenia luminescencyjnego piku satelickiego związanego ze wzbudzeniami fononów LO, wyrażajacego się liczbowo przez tzw. współczynnik Huanga-Rhysa [24]) wskazuja wyraźnie na co najmniej dwukrotny wzrost tej stałej — czyli silny wzrost oddziaływania z fononami LO w kropkach kwantowych. Zjawisko to wyjaśniliśmy [25], odwołując się do pewnej niejednoznaczności [26] określenia oddziaływania fononów LO z elektronami w kryształach. Oddziaływanie elektronów z fononami LO polega na polaryzowaniu sieci przez elektron poruszający się w krysztale. Ta polaryzacja (odpowiedni pakiet fononów optycznych) ma dynamiczny charakter i z kolei sama oddziałuje na elektron, który ja wywołał. Polaryzacje te można podzielić na dwie cześci: inercyjna, która nie nadaża za poruszającym sie elektronem i nieinercyjna, która towarzyszy poruszającemu sie elektronowi. Ta ostatnia wchodzić jednak powinna do całkowitego pola krystalicznego definiujacego sam elektron (elektron w krysztale nie jest czastką swobodną, ale w swojej definicji uwzględnia periodyczny potencjał krystaliczny — stad ma w szczególności odpowiednia mase efektywna i kwaziped zamiast pedu). Konieczność wydzielenia tylko inercyjnej części polaryzacji w oddziaływaniu elektronu z fononami LO wyraża wspomniana niejednoznaczność jego określenia. Gdy elektron jest zamkniety w kropce kwantowej, porusza się tam z kwaziklasyczna [27] predkościa dużo wieksza niż swobodny elektron sieciowy. Dlatego też w przypadku kropki, elektron skuteczniej ucieka przed dynamiczna polaryzacja, co z kolei oznacza wzrost inercyjnej cześci polaryzacji i zatem oddziaływania elektronu z fononami LO w kropkach kwantowych. Wzrost ten jest tym wiekszy, 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/ekscytonów w kropkach (odpowiadająca nanometrowym rozmiarom ograniczenia ich ruchu) jest rzędu kilku–kilkudziesięciu meV. Taka sama skala energetyczna jest jednak również charakterystyczna dla fononów w kryształach — energia fononów LA sięga do 10–20 meV na granicach strefy Brillouina, a energia fononów LO w centrum strefy Brillouina (szczelina w widmie fononów LO w punkcie  $\Gamma$  [26, 28]) jest rzędu 30 meV. 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 do silnej wzajemnej hybrydyzacji tych wzbudzeń — czyli ubierania elektronów (dziur) lub ekscytonów w fonony i tworzenia złożonych cząstek — polaronów [26, 28–32].

Tworzenie polaronów jest silnie dekoherencyjnym procesem w kropkach kwantowych (znacznie silniejszym niż w materiale litym). Dynamika tego procesu i udział w nim różnych gałęzi wzbudzeń fononowych został szczegółowo zbadany przez nas przy wykorzystaniu technik funkcji Greena [31]. Przydatność tutaj technik funkcji Greena wynika z faktu, że z ich pomocą można wyrazić funkcję korelacyjną ekscytonu (elektronu) w kropce, która określa przekrycie (iloczyn sklarny) stopniowo ubieranego w fonony stanu nośnika, z wyjściowym stanem gołego ekscytonu (elektronu) w kropce — pozwala zatem na ilościową charakterystykę wypływu informacji kwantowej (utrata ufności — *fidelity*) na skutek doplątywania (w sensie kwantowego splątania) do stanu ładunkowego w kropce deformacyjnych i polaryzacyjnych stopni swobody całego kryształu (fononów), których w żaden sposób nie można kontrolować.

Bezwładność sieci krystalicznej okazuje się być tak niekorzystną do celów utrzymania koherencji orbitalnych stopni swobody (niezaburzonej unitarnej ewolucji kwantowej wzbudzeń), że typowe czasy 'ubierania' wzbudzeń ładunkowych w fonony lokują się w zakresie pojedynczych pikosekund, a więc w samym środku sześciorzędowego 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 z powodu niespełnienia kryterium DiVincenzo.

Te silnie niekorzystne oszacowania wskazują najprawdodobniej na niemożność skalowania komputera kwantowego w technologii kropek kwantowych (ogólniej nanostruktur ciałostałowych) sterowanych światłem, przynajmniej przy obecnie znanych procedurach kwantowej korekty błędów [7, 8, 14].

Należy tu dodać, że w procesach ubierania ekscytonów w fonony (polaronowe efekty dekoherencyjne) dominującą rolę odgrywają fonony akustyczne LA (mimo że oddziaływanie ekscytonów z nimi jest dużo słabsze energetycznie, tj. co najmniej o rząd wielkości, niż w przypadku fononów LO). Silne 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.

Dekoherencja wywołana przez fonony LA (dekoherencja fazowa, czyli defazowanie, odpowiadająca zanikowi niediagonalnych elementów macierzy gęstości [9–13]) zachodzi, jak pokazaliśmy mikroskopową analizą, stosunkowo szybko i jej czas jest rzędu ilorazu rozmiaru kropki przez prędkość dźwięku (to właśnie czas rzędu pikusekundy). Fonony akustyczne są o tyle niekorzystne, że są obecne w każdym krysztale (i także w każdym amorficznym materiale) i dlatego przedstawiony mechanizm dekoherencji ma nieusuwalny charakter<sup>1</sup>.

Silne dekoherencyjne ograniczenia ewolucji kwantowej ładunkowych stopni swobody w kropkach odwróciły uwagę od konstrukcji komputera kwantowego na kropkach kwantowych sterowanego światłem [7,8,31] w kierunku spinowych stopni swobody, z którymi fonony nie oddziałują bezpośrednio. Powstało kilka koncepcji bramek logicznych przy wykorzystaniu spinu elektronów w kropkach kwantowych (rozdział 2).

## 1.1. Fononowe defazowanie zlokalizowanego ekscytonu w kropce kwantowej

Szybko (nieadiabatycznie) wzbudzany w kropce ekscyton (w praktyce subpikosekundowo) [5,6,33] jest gołą czastką (parą elektron–dziura), która stopniowo ubiera się w fonony, tworząc polaron. Czas tworzenia polaronu wiąże się z inercją sieci, jest stosunkowo długi i istotnym zadaniem jest jego ocena. Proces hybrydyzacji zlokalizowanego w kropce ekscytonu z kolektywnymi wzbudzeniami sieci kryształu otaczającego kropkę jest w istocie ewolucją czasową niestacjonarnego stanu, który w chwili początkowej (w momencie wzbudzenia) jest stanem gołego ekscytonu — nie jest zatem stanem stacjonarnym całego układu: ekscyton w kropce + oddziałujące z nim morze fononów kryształu (stanem stacjonarnym takiego złożonego układu jest polaron). Niestacjonarny stan początkowy (goły ekscyton)<sup>2</sup> podlega dalszej niestacjonarnej ewolucji. W stanie niestacjonarnym energia nie jest określona, jednak średnia energia dzielona jest w zmieniający się w czasie sposób między podukładami: kropką i morzem fononów. Goły ekscyton w kropce ma za dużą energię średnią w stosunku do polaronu (polaron ma mniejszą energię

 $<sup>^1\,</sup>$ W temperaturze 0 K także następuje silne defazowanie w wyniku wzbudzania fononów, w wyższych temperaturach efekty defazowania wzmacniane są też przez pochłanianie fononów, coraz liczniej występujących wraz ze wzrostem temperatury.

 $<sup>^2\,</sup>$ Pole elektryczne fali e-m oddziałuje z ładunkiem i dlatego wzbudza goły elektron z pasma walencyjnego do kropki, po którym dziura też przechwycona jest przez kropkę — powstaje w kropce goły ekscyton.

i dlatego powstaje w wyniku minimalizacji energii przez oddziaływanie z fononami) i ta nadmiarowa energia deformacyjna sieci (dla fononów akustycznych) i polaryzacyjna (dla fononów optycznych) jest unoszona na zewnatrz obszaru kropki przez odpowiednio fonony LA i LO (ich pakiety falowe). W kropce natomiast tworzy sie polaron — zhybrydyzowany stan ekscytonu ubranego w chmure fononów LA i LO<sup>3</sup>. Czas formowania sie polaronu w kropce jest zatem rzedu czasu opuszczenia obszaru kropki przez fononowy pakiet falowy. Należy podkreślić, że nie jest to proces, który można by opisać przez przejścia kwantowe ujete w złotej regule Fermiego<sup>4</sup> [27]. Proces tworzenia polaronu to ewolucja niestacjonarnego stanu i tylko w sensie wirtualnym (tj. bez zachowania energii) można mówić o procesach elementarnych pochłaniania lub emisii fononów — zauważmy, że energia polaronu jest przesunięta w stosunku do energii gołego ekscytonu w kropce o kilka zaledwie meV [31], podczas gdy energia fononów LO ma szczeline dużo wieksza,  $\hbar\Omega \simeq 36.4$  meV (w GaAs). Kinetyka tworzenia polaronu odpowiada zatem koherentnej ewolucji splatanego stanu dwóch oddziałujących układów: ekscytonu w kropce i morza fononów (różnych typów) i stan ten nie jest separowalny [31].

Układ ekscyton(elektron)-fonony opisany jest hamiltonianem:

$$H = \sum_{n} E_{n} a_{n}^{+} a_{n} + \sum_{\mathbf{q},s} \hbar \omega_{s}(\mathbf{q}) c_{\mathbf{q},s}^{+} c_{\mathbf{q},s} + \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q},n_{1},n_{2},s} F_{s}(n_{1},n_{2},\mathbf{q}) a_{n_{1}}^{+} a_{n_{2}} \left( c_{\mathbf{q},s} + c_{-\mathbf{q},s}^{+} \right),$$
(1.1)

gdzie oddziaływanie z fononami LO  $(s=\mathrm{o})$ i LA  $(s=\mathrm{a})$ jest opisane przez funkcje

$$F_{o}(n_{1}, n_{2}, \mathbf{q}) = -\frac{e}{q} \sqrt{\frac{2\pi\hbar\Omega}{v\tilde{\epsilon}}} \int \Phi_{n_{1}}^{*}(\mathbf{R}_{e}, \mathbf{R}_{h}) \times \left(e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_{e}} - e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_{h}}\right) \Phi_{n_{2}}(\mathbf{R}_{e}, \mathbf{R}_{h}) d^{3}\mathbf{R}_{e} d^{3}\mathbf{R}_{h}$$
(1.2)

i

$$F_{\mathbf{a}}(n_{1}, n_{2}, \mathbf{q}) = -\sqrt{\frac{\hbar q}{2MC_{\mathbf{a}}}} \int \Phi_{n_{1}}^{*}(\mathbf{R}_{e}, \mathbf{R}_{h}) \times \left(\sigma_{e}e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_{e}} - \sigma_{\mathbf{h}}e^{i\mathbf{q}\mathbf{R}_{h}}\right) \Phi_{n_{2}}(\mathbf{R}_{e}, \mathbf{R}_{h})d^{3}\mathbf{R}_{e}d^{3}\mathbf{R}_{h}.$$
(1.3)

 $<sup>^3\,</sup>$ Nazwa polaron odnosi się właściwie do elektronów ubranych w fonony LO [28] — dominujący proces w silnie polarnych materiałach; tutaj uogólniamy tę nazwę na elektron lub ekscyton ubrany we wszystkie rodzaje fononów.

 $<sup>^4\,</sup>$  Przejścia kwantowe w takim ujęciu to przejścia między stanami stacjonarnymi w wyniku zaburzenia zależnego od czasu.

Tutaj  $c_{\mathbf{q},s}^{(+)}$  oznaczają bozonowe operatory anihilacji (kreacji) dla fononów LO/LA z kwazipędem **q** i z częstością  $\omega_{o}(\mathbf{q}) \equiv \Omega_{\mathbf{q}} \simeq \Omega - \beta q^{2}$  ( $\Omega$  oznacza szczelinę energetyczną dla fononów LO w punkcie  $\Gamma$ ) i  $\omega_{a}(\mathbf{q}) = C_{a}q$ ,  $C_{a}$  — prędkość dźwięku (LA), M jest masą jonów w komórce elementarnej,  $\sigma_{e,h}$  — potencjał deformacyjny odpowiednio dla elektronu i dziury, v — objętość komórki elementarnej, N — liczba komórek w krzysztale,  $\tilde{\epsilon} = (1/\epsilon_{\infty} - 1/\epsilon_{0})^{-1}$  — efektywna przenikalność dielektryczna,  $\mathbf{R}_{e}, \mathbf{R}_{h}$  oznaczają współrzędne elektronu i dziury,  $\varPhi_{n}(\mathbf{R}_{e}, \mathbf{R}_{h})$  jest funkcją falową ekscytonu (elektronu) w kropce i  $a_{n}^{(+)}$  — operatory anihilacji (kreacji) ekscytonu (elektronu), które są bozonowe (fermionowe), s numeruje gałąź fononową — uwzględniamy tu fonony podłużne optyczne (LO) (s = o) i podłużne akustyczne (LA) (s = a). Ponieważ oddziaływanie ładunku z podłużnych [26,28]. Oddziaływanie fononów z obu gałęzi z ekscytonem (trzecia część hamiltonianu) ma najprostszą strukturę — liniową w operatorach fononowych. Można to przedstawić grafami jak na rys. 1.1.



Rysunek 1.1. Wierzchołki reprezentujące oddziaływanie ekscyton–fonon; linie przerywane — fonony; linie ciągłe — ekscytony

Tego typu wierzchołki (jak na rys. 1.1) powodują, że operator masowy funkcji Greena, zarówno ekscytonowej (elektronowej), jak i fononowej, ze względu na to oddziaływanie nie ma liniowego członu i najniższy co do rzędu w tym oddziaływaniu człon odpowiada grafowi jak na rys. 1.2.

Dwa dolne grafy odpowiadają pełnym wyrażeniom na operator masowy (grube linie reprezentują pełne funkcje Greena; zaznaczono też efektywny wierzchołek oddziaływania ekscytonu z fononami – obszar zaciemniony). Taka postać operatora masowego jest dokładna. W pierwszym przybliżeniu efektywny wierzchołek można zastąpić gołym (jest to przybliżenie o kontrolowanej dokładności — pomija się człony wyższe niż kwadratowe w oddziaływaniu<sup>5</sup>. Uwzględniając, że oddziaływanie ładunków z fononami jest słabe, przybliżenie to jest obarczone małym błędem. Gołe wierzchołki tego oddziaływania (funkcje występujące w hamiltonianie) mają postać (wynikającą z mechanizmu oddziaływania ładunku z fononami LO — poprzez polaryzację i z fononami LA — poprzez deformację) [26, 28] podaną formułami (1.2, 1.3), gdzie całki w tych wyrażeniach opisują przekrycie zlokali-

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup> Do efektywnego wierzchołka wchodzą kolejne gołe wierzchołki.



Rysunek 1.2. Operator masowy ekscytonu; dwa dolne grafy odpowiadają pełnym wyrażeniom na operator masowy (grube linie reprezentują pełne funkcje Greena; zaznaczono też efektywny wierzchołek oddziaływania ekscytonu z fononami — obszar zacieniony)

zowanych stanów (początkowego i końcowego) ekscytonu i fali płaskiej fononu sieciowego. Wyrażają one charakterystyczny dla kropek kwantowych efekt szyjki butelki (*bottle-neck effect*) [34, 35], związany z brakiem translacyjnej niezmienniczości układu kropki i zatem brakiem zachowania pędu (kwazipędu). Całka przekrycia z falą płaską prowadzi tu do preferencji pędów  $q \simeq \hbar/d$ , gdzie d jest rozmiarem kropki. Gdyby ekscyton nie był zlokalizowany — czyli opisany falą płaską — otrzymalibyśmy w wyniku tej całki zasadę zachowania pędu odpowiadającą translacyjnej niezmienniczości układu w takim przypadku; w przypadku zlokalizowanego ekscytonu (na kropce kwantowej) całka ta nie sprowadza się do delty Diraca, ale określa te kwazipędy fononów **q**, które będą odgrywały rolę w oddziaływaniu. Równocześnie dla każdego wierzchołka (procesu oddziaływania) spełniona jest zasada zachowania energii — co wynika z jednorodności czasu, niezaburzonej w przypadku zlokalizowanych na kropkach stanów.

Fakt wybierania przez podane funkcje określonych kwazipędów dla zlokalizowanych na kropkach kwantowych stanów ekscytonowych (elektronowych) nazywany jest właśnie efektem szyjki butelki. Podane całki eliminują wszystkie mody fononowe poza tymi, które leżą w pobliżu  $q \simeq \hbar/d$  (d jest rozmiarem kropki kwantowej, typowo rzędu 10 nm), zatem obszar istotnych kwazipędów fononów



Rysunek 1.3. Porównanie zależności formfaktora oddziaływania ekscyton–fonon LO  $(\sim k^2 e^{-ak^2})$ , i LA  $(\sim k e^{-ak^2})$ , zgodnie z równaniami (1.5) dla różnych wartości a

oddziałujących z ładunkiem w kropce jest rzędu około 1–10% strefy Brillouina w pobliżu jej środka – tak jak to przedstawiano na rysunkach 1.3–1.5. Na rysunku 1.4 linia przerywana (ciągła) odpowiada gęstościom prawdopodobieństwa elektronu (dziury) w stanie podstawowym ekscytonu [31], modelowanym wariacyjnie; dalej podana jest analityczna postać tych funkcji [31].

Dla modelowej (wariacyjnej) funkcji falowej ekscytonu w parabolicznej kropce kwantowej dla stanu podstawowego ekscytonu (uwzględniając oddziaływanie kulombowskie e-h) przyjmujemy postać:

$$\Phi_0(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \frac{1}{(\pi)^{3/2}} \frac{1}{L_e L_h L_z} \exp\left[-\frac{r_{e\perp}^2}{2L_e^2} - \frac{r_{h\perp}^2}{2L_h^2} - \frac{z_e^2 + z_h^2}{L_z^2}\right], \quad (1.4)$$

gdzie  $r_{e,h\perp}$  to położenia składników (e i h) w płaszczyźnie kropki xy. Numerycznie znalezione parametry dla kropki o charakterystykach podanych w tabeli 1.1 wynoszą  $L_e = 6,6$  nm,  $L_h = 5,1$  nm, i  $L_z = l_z$ . Są one dostatecznie zgodne z dokładniejszym rachunkiem numerycznym — dokładna diagonalizacja [31]; zgodność ta jest przedstawiona na rysunku 1.5. Różnica między eklektronem i dziurą wynika tu z faktu, że kulombowska energia oddziaływania e-h jest porównywalna z odległościami międzypoziomowymi cięższych dziur, podczas gdy lżejsze elektrony są silniej energetycznie skwantowane (mają większe międzypoziomowe odległości energetyczne).

Dla podanej postaci funkcji falowej ekscytonu w stanie podstawowym w kropce można łatwo obliczyć funkcje sprzężenia z fononami:

$$|F_{\rm o}(0,0,\mathbf{k})|^{2} \simeq \frac{\pi e^{2}\hbar\Omega k^{2}}{18v\tilde{\epsilon}} (L_{e}^{2} - L_{h}^{2})^{2} e^{-\alpha k^{2}} = g_{\rm o} \frac{k^{2}}{k_{m}^{2}} e^{-\alpha k^{2}},$$

$$|F_{\rm a}(0,0,\mathbf{k})|^{2} \simeq \frac{\hbar k}{2MC_{\rm a}} (\sigma_{e} - \sigma_{h})^{2} e^{-\alpha k^{2}} = g_{\rm a} \frac{k}{k_{m}} e^{-\alpha k^{2}},$$
(1.5)



Rysunek 1.4. Gęstość prawdopodobieństwa dla elektronu (linia ciągła) i dziury (linia przerywana) w stanie podstawowym ekscytonu w porównaniu do nie oddziałujących kulombowsko cząstek (linia punktowa) [31]

gdzie  $k_m = (6\pi^2/v)^{1/3}$  jest falowym wektorem Debye'a ( $\simeq 1,1\cdot 10^{10} \text{m}^{-1}$ ),  $\alpha = l^2/2$ , l jest tu rozmiarem kropki uśrednionym po wszystkich kierunkach (tj. uśrednionym po kierunkach rozmiarem stanu podstawowego ekscytonu), takim samym dla e i h (l jest dużo mniejsze niż boczne rozmiary  $L_{e(h)}$ , ale większe niż pionowy rozmiar,  $L_z$ ). Czynnik eksponencjalny  $e^{-\alpha k^2}$  odpowiada omawianemu efektowi szyjki butelki w kropce kwantowej. Te funkcje opisują linie na rys. 1.3 i 1.5 (dobrze aproksymują dokładniejszy numeryczny rezultat [31] — linia ciągła na rys. 1.5). Widać, że obie funkcje (nazywane często formfaktorami oddziaływania ekscyton-fonon) są niezerowe w pobliżu punktu  $\Gamma$  i osiągają swoje maksimum dla kwazipędu  $p \simeq \frac{\hbar}{d}$  ( $d \sim l$ ). Podkreślmy jeszcze raz, że jest to efekt związany z niewspółmiernością zlokalizowanego stanu na kropce kwantowej i niezlokalizowanego fononu (*bottle-neck*, zastępujący zasadę zachowania pędu układu bez translacyjnej inwariantności) [34, 35].

Efekt szyjki butelki (pozornie ograniczający rolę fononów w przypadku nanostruktur) był powodem niedostrzegania istotnej roli fononów w przypadku kropek i oczekiwania, że oddziaływanie z nimi jest pomniejszone w nanostrukturach [34]. Ten, jak się okazuje, mylny pogląd, często prowadził do niedocenienia roli fononów w wielu sytuacjach fizycznych związanych z kropkami. Mimo niewielkich wartości stałych sprzężenia (i formfaktorów uwzględniających *bottle-neck*) rezonansowa bliskość energetyczna poziomów kwantowych, zlokalizowanych nośników w kropkach i charakterystyk energetycznych fononów, powoduje wzrost roli nieperturbacyjnych efektów wzajemnej modyfikacji — hybrydyzacji obu podukładów (ekscytonów/elektronów i fononów), prowadząc do znaczących efektów ty-



Rysunek 1.5. Funkcje oddziaływania ekscyton–fonon LA i LO w kropce w stanie podstawowym ekscytonu — zgodnie z formułami (1.5) (linia przerywana) z dokładnej diagonalizacji numerycznej (linia ciągła) [31]

pu polaronowego, zarówno dla fononów LA, jak i LO. Odgrywa to istotną rolę dla kropek kwantowych, w których takie hybrydyzacyjne efekty zmieniają stany kwantowe w zakresie do 10% i powodują zasadnicze efekty w zakresie czasowych procesów dekoherencji amplitudowej (relaksacji, czyli dekoherencji amplitudowej — zmniejszania diagonalnych elementów macierzy gęstości) [30,36,37], jak i fazowej (defazowanie, dekoherencja fazowa — zmniejszania niediagonalnych elementów macierzy gęstości) [9–13]. Posługując się zestawieniem parametrów układu GaAs/InAs (tab. 1.1), łatwo zauważyć, że oddziaływanie ekscytonu z fononami LO jest znacznie (co najmniej o rząd wielkości) silniejsze niż z fononami LA (wartości parametrów g w formułach (1.5)).

W celu opisania utraty wierności (fidelity loss) [9,14] będziemy rozważać ekscytonową funkcję korelacyjną  $\langle a_{n_1}(t)a_{n_2}^+(0)\rangle$ . Dla  $n_1 = n_2$  odpowiada ona 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 jest zatem miarą ufności zależnego od czasu (niestacjonarnego) stanu ekscytonu. Uśrednienie  $\langle ... \rangle$  oznacza tu temperaturowe uśrednienie po stanach fononów przy założeniu stanu próżni ekscytonowej [39], tzn. bez zmiany stanu gołego ekscytonu, co wiąże się z faktem, że sektor w wielkim rozkładzie kanonicznym bez ekscytonów (próżnia) jest energetycznie mocno oddalony, rzędu 1 eV (energia wzbudzenia ekscytonu), od kolejnych sektorów ekscytonowych.

Transformata Fouriera funkcji korelacyjnej jest nazywana intensywnością spektralną [15, 16, 40]

$$I_{n_1,n_2}(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \langle a_{n_1}(t) a_{n_2}^+(0) \rangle e^{i\omega t} dt, \qquad (1.6)$$

Intensywność spektralna może być z kolei przedstawiona poprzez urojoną część retardowanej funkcji Greena:

$$Im G_{\rm r}(n_1, n_2, \omega) = -I(n_1, n_2, \omega)/(2\hbar), \qquad (1.7)$$

gdzie

$$G_{\mathbf{r}}(n_1, n_2, t) = -\frac{i}{\hbar} \Theta(t) \langle [a_{n_1}(t), a_{n_2}^+(0)]_- \rangle$$
  
$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G_{\mathbf{r}}(n_1, n_2, \omega) e^{-i\omega t} d\omega,$$
 (1.8)

jest komutacyjną retardowaną funkcją Greena ekscytonu określającą liniową odpowiedź dielektryczną na zaburzenie e-m (w przypadku natychmiastowego wzbudzenia ekscytonu sygnał e-m ma postać delty Diraca  $\delta(t)$ ). Funkcja  $G_r(n_1, n_2, t)$ i funkcja korelacyjna mogą być znalezione w naszym przypadku przez uwzględnienie oddziaływania ekscytonu z morzem fononów LO i LA, metodami temperaturowych matsubarowskich funkcji Greena — standardowymi technikami przedłużeń analitycznych reprezentacji fourierowskich [15, 16] (lub ekwiwalentnie za pomocą temperaturowych kauzalnych funkcji Greena [40]. Przewaga matsubarowskich funkcji Greena polega na elegancji wyprowadzenia równania Dysona z operatorem masowym i jego modelowania za pomocą grafów Feynmana; techniki funkcji kauzalnych wymagają analitycznych procedur typu rozszczepień Tyablikova [40] o mniejszej przejrzystości, jednakże w pełni ekwiwalentnych z technikami matsubarowskimi. Obie metody prowadzą do równania Dysona z odpowiednim operatorem masowym, poprzez który włącza się oddziaływanie ekscytonu z morzem fononów.

W przypadku słabego sprzężenia ekscyton-fonony (a z takim mamy tu do czynienia) operator masowy przyjmuje postać [15, 16, 40] zgodnie z grafami jak na rys. 1.2. Podobnie jak wcześniej było to przedmiotem analiz w układzie litym półprzewodnika [41], uzyskujemy tu 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 postaci (gdyż odrzucając człony wyższego rzędu w efektywnym wierzchołku, pomijamy procesy wielofononowe):

$$\begin{aligned} \Delta_n(\omega) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},s,n_1} |F_s(n,n_1,\mathbf{k})|^2 \\ & \left[ \frac{(1+N_{\mathbf{k},s})[\hbar\omega - E_{n_1} - \Delta_{n_1}(\omega - \omega_s(\mathbf{k})) - \hbar\omega_s(\mathbf{k})]}{[\hbar\omega - E_{n_1} - \Delta_{n_1}(\omega - \omega_s(\mathbf{k})) - \hbar\omega_s(\mathbf{k})]^2 + \gamma_{n_1}^2(\omega - \omega_s(\mathbf{k}))} \right. \\ & \left. + \frac{N_{\mathbf{k},s}[\hbar\omega - E_{n_1} - \Delta_{n_1}(\omega + \omega_s(\mathbf{k})) + \hbar\omega_s(\mathbf{k})]}{[\hbar\omega - E_{n_1} - \Delta_{n_1}(\omega + \omega_s(\mathbf{k})) + \hbar\omega_s(\mathbf{k})]^2 + \gamma_{n_1}^2(\omega + \omega_s(\mathbf{k}))} \right] (1.9) \end{aligned}$$

$$\gamma_{n}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},s,n_{1}} |F_{s}(n,n_{1},\mathbf{k})|^{2} \\ \left[ \frac{(1+N_{\mathbf{k},s})\gamma_{n_{1}}(\omega-\omega_{s}(\mathbf{k}))}{[\hbar\omega-E_{n_{1}}-\Delta_{n_{1}}(\omega-\omega_{s}(\mathbf{k}))-\hbar\omega_{s}(\mathbf{k})]^{2}+\gamma_{n_{1}}^{2}(\omega-\omega_{s}(\mathbf{k}))} + \frac{N_{\mathbf{k},s}\gamma_{n_{1}}(\omega+\omega_{s}(\mathbf{k}))}{[\hbar\omega-E_{n_{1}}-\Delta_{n_{1}}(\omega+\omega_{s}(\mathbf{k}))+\hbar\omega_{s}(\mathbf{k})]^{2}+\gamma_{n_{1}}^{2}(\omega+\omega_{s}(\mathbf{k}))} \right], \quad (1.10)$$

gdzie  $N_{\mathbf{k},s}$  jest 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  $T = 0, N_{\mathbf{k},s} = 0$ ). Powyższy układ równań pozwala na analizę czasowego procesu ubierania ekscytonu w chmurę fononową.

Odnośnie do materiału otoczenia kropki, tj. GaAs, dane materiałowe podajemy za pracą [42], a dla kropki InAs/GaAs przyjmujemy 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, co prowadzi do jednakowego rozmiaru stanu podstawowego elektronu i dziury (bez oddziaływania kulombowskiego); pionowy rozmiar kropki wybieramy (kropka jest silnie spłaszczona)  $l_z^{e(h)} \simeq 2$  nm (z odpowiednio dopasowana krzywizna paraboli  $\omega_z^{e(h)6}$ .

Dla oddziaływania ekscytonu z fononami LO istotna jest stała Fröhlicha [26, 28]:

$$\alpha_e = \frac{e^2}{\tilde{\epsilon}} \sqrt{\frac{m^*}{2\hbar^3 \Omega}}.$$
(1.11)

Wzrasta ona silnie w nanostrukturach [25,29], co ma istotny wpływ na procesy polaronowe w kropkach. Wyjaśnienie silnego wzrostu sprzężenia z fononami LO będzie przedstawione w jednym z kolejnych podrozdziałów.

W równaniu (1.9) główny wkład daje pierwszy człon — przesunięcie energetyczne *red-shift* polaronu jest wywołane przez dominujące w materiale polarnym (GaAs jest słabo polarnym materiałem) oddziaływanie ekscytonu z fononami LO. Zwróćmy uwagę, że równania (1.9)–(1.10) zawierają pełną funkcję Greena (zgod-

i

<sup>&</sup>lt;sup>6</sup> Badania numeryczne zależności polaronu od kształtu kropki i sposobu jej modelowania pozaparabolicznym przybliżeniem wskazują na niewielki wpływ sposobu modelowania struktury kropki [31].

nie z grafem na rys. 1.2). Kładąc  $\gamma_n(\omega) = 0$  w prawej części równania (1.9), jako pierwsze przybliżenie na przesunięcie enegetyczne znajdujemy:

$$\Delta_{n}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},n_{1}} |F_{o}(n,n_{1},\mathbf{k})|^{2} \left[ \frac{1+N_{\mathbf{k},o}}{\hbar\omega - E_{n_{1}} - \Delta_{n_{1}}(\omega - \Omega) - \hbar\Omega} \right] + \frac{N_{\mathbf{k},o}}{\hbar\omega - E_{n_{1}} - \Delta_{n_{1}}(\omega - \Omega) + \hbar\Omega} + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},n_{1}} |F_{a}(n,n_{1},\mathbf{k})|^{2} \left[ \frac{1+N_{\mathbf{k},a}}{\hbar\omega - E_{n_{1}} - \Delta_{n_{1}}(\omega - C_{a}k) - \hbarC_{a}k} + \frac{N_{\mathbf{k},a}}{\hbar\omega - E_{n_{1}} - \Delta_{n_{1}}(\omega - C_{a}k) + \hbarC_{a}k} \right].$$
(1.12)

Jak zauważyliśmy wyżej, pierwszy człon tego równania wnosi dominujący wkład i drugi — co najmniej o rząd mniejszy (z powodu mniejszej stałej sprzężenia z fononami LA), można zaniedbać w tym miejscu. Ten człon wnosi jednak istotniejszy niż człon pierwszy wkład do pochodnej  $d\Delta/d\omega|_{\omega=E+\Delta}$ . Pochodna pierwszego członu [~  $F^2/(\hbar\Omega)^2$ ] jest mała z powodu szczeliny w dyspersji fononów LO. Ta pochodna jest istotna dla określenia reziduum funkcji Greena w biegunie w równaniu (1.15). Dodatkowo w pierwszym członie rozważanego równania zaniedbujemy słabą dyspersję fononów LO, gdyż nie wnosi ona istotnej poprawki do przesunięcia energetycznego  $\Delta$  (co sprawdzono numerycznie) [31]. Numeryczne rozwiązanie równania (1.12) dla n = 0 prowadzi do obliczenia przesunięcia energetycznego polaronu  $\Delta_0 \sim -5$  meV (dla parametrów struktury jak podano w tab. 1.1).

Dla opisu kinetyki tworzenia polaronu, czyli procesu defazowania wzbudzonego nieadiabatycznie (tj. szybko, w praktyce subpikosekundowo [33]) ekscytonu najistotniejsza jest urojona część operatora masowego i pozabiegunowe zachowanie urojonej części funkcji Greena — potrzebna jest bowiem pełna znajomość intensywności spektralnej (nie tylko biegunów określających energię i czasy życia wzbudzeń, czyli kwazicząstek, tutaj polaronu), której transformata Fouriera daje poszukiwaną funkcję korelacyjną. Urojona część operatora masowego określona jest równaniem (1.10). Kładąc w jego prawej stronie  $\gamma = 0$ , otrzymujemy:

$$\gamma_{n}(\omega) = \frac{\pi}{N} \sum_{\mathbf{k},n_{1}} \left\{ |F_{o}(n,n_{1},\mathbf{k})|^{2} \left[ (1+N_{\mathbf{k},o})\delta(\hbar\omega - E_{n_{1}} - \Delta_{n_{1}} - \hbar\Omega_{\mathbf{k}}) + N_{\mathbf{k},o}\delta(\hbar\omega - E_{n_{1}} - \Delta_{n_{1}} + \hbar\Omega_{\mathbf{k}}) \right] + |F_{a}(n,n_{1},\mathbf{k})|^{2} \left[ (1+N_{\mathbf{k},a})\delta(\hbar\omega - E_{n_{1}} - \Delta_{n_{1}} - \hbarC_{a}k) + N_{\mathbf{k},a}\delta(\hbar\omega - E_{n_{1}} - \Delta_{n_{1}} + \hbarC_{a}k) \right] \right\}.$$
(1.13)

FiXme: N mam wca pewności c ten wz wyglą lepiej – w się łątwa czyta.

Tabela 1.1. Parametry kropki i materiału otoczenia, GaAs/InAs

1	Masa efektywna elektronu w GaAs	$m_e^*$	$0,067 \ m_e$
	Masa efektywna dziury (ciężkiej) w GaAs	$m_h^*$	$0,38 m_e$
	Przenikalność dielektryczna w GaAs (statyczna)	$\epsilon_0$	12,9
	Przenikalność dielektryczna w GaAs (dynamicz-	$\epsilon_{\infty}$	10,9
	na)		
	Potencjał deformacyjny elektronu w GaAs	$\sigma_e$	6,7  eV
	Potencjał deformacyjny dziury w GaAs	$\sigma_h$	$-2.7  {\rm eV}$
	Energia fononów LO w punkcie $\varGamma$ w GaAs	$\hbar\Omega$	36,4  meV
	Gęstość GaAs	ρ	$5,36 \mathrm{~g/cm^3}$
	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	$\hbar \omega_0^{\dot{h}}$	3,5  meV
	Rozmiar kropki kwazi-2D (elektron)	$l_e = \sqrt{rac{\hbar}{m_e^*\omega_0^e}}$	7,5  nm
	Rozmiar kropki kwazi-2D (dziura)	$l_h = \sqrt{rac{\hbar}{m_h^* \omega_0^h}}$	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 Ga As- $bulk~({\rm elektronu})$	$\alpha_e = \frac{e^2}{\tilde{\epsilon}} \sqrt{\frac{m_e^*}{2\hbar^3\Omega}}$	0,07
	Stała Fröhlicha w kropce GaAs/InAs (elektronu)	$\alpha'_e = \frac{e^2}{\tilde{\epsilon'}} \sqrt{\frac{m^*_e}{2\hbar^3\Omega}}$	$0,\!15$

Tabela 1.2. Parametry oddziaływania ekscyton–fonon LA i LO dla kropki $${\rm GaAs}/{\rm InAs}$$ 

Stała sprzężenia ekscyton–fonon LA	$A = \frac{(\sigma_e - \sigma_h)^2}{4\pi\rho\hbar^3 C_a^5} \simeq 0,29 \text{ meV}^{-2}$
Stała sprzężenia ekscyton–fonon LO	$B = \frac{e^2 \hbar \Omega (L_e^2 - L_h^2)^2}{36 \tilde{\epsilon} 2(\hbar\beta)^{5/2}}$
	$\simeq \left(\frac{l[\mathrm{nm}]}{6}\right)^4 6.3 \times 10^5 \mathrm{meV}^{-1/2}$
Rozmiar ekscytonu (elektronu)	$L_e \simeq 6.6 (l[\text{nm}]/6) \text{ nm}$
Rozmiar ekscytonu (dziury)	$L_h \simeq 5.1 (l[\text{nm}]/6) \text{ nm}$
Wykładnik w operatorze masowym (LA)	$\frac{\alpha}{\hbar^2 C^2} \simeq (l[\text{nm}]/6)^2 1.8 \text{ meV}^{-2}$
Wykładnik w operatorze masowym (LO)	$\frac{\alpha}{\hbar\beta} \simeq (l[\mathrm{nm}]/6)^2 149 \text{ meV}^{-1}$



Rysunek 1.6. 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 temperatury); procesy absorpcji są nieistotne dla fononów LO w tym zakresie temperatury (lewy pik satelicki odpowiadający absorpcji fononów LO jest o 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 [24] — stała Fröhlicha *bulk* (a), w kropce (b) Pierwszy człon w równaniu (1.13) określa transfer energii polaryzacyjnej do morza fononów LO, drugi natomiast opisuje transfer energii (mniejszej) deformacyjnej do morza fononów LA, w czasie stopniowego ubierania ekscytonu w mody fononowe obu typów. Człon  $\gamma$  możemy oszacować dla stanu podstawowego ekscytonu (n = 0), zaniedbując wyższe wzbudzone poziomy ekscytonowe i wykonując całkowanie względem **k** 

$$\gamma_{0}(\omega) \simeq Ax^{3}e^{-\frac{\alpha x^{2}}{\hbar^{2}C_{a}^{2}}} \left[\Theta(x)(1+N(x)) - \Theta(-x)N(-x)\right]$$

$$+B \left[\Theta(\hbar\Omega - x)(\hbar\Omega - x)^{3/2}e^{-\frac{\alpha(\hbar\Omega - x)}{\hbar\beta}}\Theta(-0.6\hbar\Omega + x)(1+N(x)) + \Theta(\hbar\Omega + x)(\hbar\Omega + x)^{3/2}e^{-\frac{\alpha(\hbar\Omega + x)}{\hbar\beta}}\Theta(-0.6\hbar\Omega - x)N(-x)\right],$$

$$(1.14)$$

gdzie  $x = \hbar \omega - \tilde{E}_0, \ \tilde{E}_0 = E_0 - \Delta_0$  jest energią ekscytonowego polaronu,  $N(x) = (e^{\frac{x}{k_B T}} - 1)^{-1}$ ,

$$A = \frac{(\sigma_{\rm e} - \sigma_{\rm h})^2}{4\pi\rho\hbar^3 C_{\rm a}^5}, \quad B = \frac{e^2\hbar\Omega(L_{\rm e}^2 - L_{\rm h}^2)^2}{36\tilde{\epsilon}2(\hbar\beta)^{5/2}},$$

gdyż dyspersję fononów LO przyjmujemy w postaci [43]  $\Omega_{\mathbf{k}} = \Omega - \beta k^2$  i dla granicy strefy  $k = k_m$ ,  $\Omega_{\mathbf{k}_m} = 0,6\Omega$ . Pierwszy człon w równaniu (1.14) odpowiada kanałowi dyssypacji energii do fononow LA, natomiast drugi — kanałowi dyssypacji do fononow LO. Parametry liczbowe tego równania dla badanej struktury (tab. 1.1) podano w tab. 1.2.

Ponieważ  $\gamma_0$  jest równe 0 w x = 0, co wynika z równania (1.14), punkt ten jest dobrze określonym biegunem funkcji Greena (odpowiada stabilnej kwazicząstce — ekscytonowemu polaronowi, czyli ekscytonowi ubranemu w chmury fononowe, co stanowi uogólnienie zwykłego elektronowego polaronu ubranego tylko w chmurę fononów LO [28, 36]). Ewolucja czasowa ubierania w fonony opisana jest przez funkcję korelacyjną, związaną z funkcją Greena, która może być zapisana w postaci:

$$G_{\mathbf{r}}(0,0,\omega) = \frac{1}{\hbar\omega - E_0 - \Delta(\omega) + i\gamma(\omega) + i\epsilon} = \frac{a^{-1}}{x + i\gamma'(x) + i\epsilon},$$
(1.15)

gdzie

$$a = 1 - \frac{d\Delta(\omega)}{\hbar d\omega} \Big|_{\omega = \tilde{E}'_0} = 1 + \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},s} \left| \frac{F_s(0,0,\mathbf{k})}{\hbar \omega_{s(\mathbf{k})}} \right|^2 [1 + 2N_s(\mathbf{k})], \quad (1.16)$$



Rysunek 1.7. Ewolucja pasma bocznego pochodzącego od fononów akustycznych (LA) w zależności od rozmiaru kropki i od temperatury dla  $T \ge 0$  K; takie same temperatury dla każdego z rozmiarów kropki  $l=3,6,12~{\rm nm}$ 

 $\gamma'(x)=\gamma(x)/a\;(x=\hbar\omega-\tilde{E_0'},\tilde{E_0'}=\tilde{E_0}/a),\,\epsilon=0+.$ Urojona część tej retardowanej funkcji Greena (1.15) ma postać

$$\operatorname{Im} G_{\mathbf{r}}(0,0,\omega) = -a^{-1}\pi\delta(x) - \frac{a^{-1}\gamma'(x)/x^2}{1 + (\gamma'(x)/x)^2}.$$
(1.17)

Odwrotna transformata Fouriera intesywności spektralnej (urojonej części retardowanej funkcji Greena) prowadzi do funkcji korelacyjnej w reprezentacji czasowej

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

(indeksy $n_1=n_2=0$ funkcji Isą tu ukryte). Pierwszy człon w (1.17) prowadzi do

$$I^{(1)}(t) = a^{-1}e^{-i\frac{\tilde{E_0}}{\hbar}t}.$$



Rysunek 1.8. Ewolucja piku satelickiego (prawego — związanego z emisją fononów) pochodzącego od fononów optycznych (LO) w zależności od rozmiaru kropki; w zasadzie nie zależy od temperatury dla  $T<80~{\rm K}$ 

Zauważmy, że w drugim członie w równaniu (1.17), dla temperatur T < 100 K można pominąć drugi człon w mianowniku (jest mały w stosunku do pierwszego) dla fononów LA (jest to zgodne z założoną dokładnością równania na operator masowy). To pozwala na zmianę kolejności całkowania względem  $\omega$  i k — najpierw można wykonać odwrotną transformatę Fouriera i wykorzystać deltę Diraca w równaniu (1.13). Takie całkowanie po częstości (energii) prowadzi do wygodnej reprezentacji dla funkcji korelacyjnej

$$I^{(2)}(t) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left| \frac{F_{\mathbf{a}}(0,0,\mathbf{k})}{\hbar\omega_{\mathbf{a}}(\mathbf{k})} \right|^{2} \times \left\{ [1+N_{s}(\mathbf{k})]e^{-i[\tilde{E}_{0}/\hbar+\omega_{s}(\mathbf{k})]t} + N_{s}(\mathbf{k})e^{-i[\tilde{E}_{0}/\hbar-\omega_{s}(\mathbf{k})]t} \right\}.$$
 (1.18)

Zauważmy, że porównując z równaniem (1.16), dla t = 0 mamy  $I^{(1)}(t = 0) = a^{-1}$  i  $I^{(2)}(t = 0) = 1 - a^{-1}$ , co daje prawidłową normalizację funkcji korelacyjnej.

Intensywność spektralna i jej odwrotna transformata Fouriera (jej moduł) są zaprezentowane na rys. 1.6–1.11 dla różnych temperatur i rozmiarów kropek. Dobra zgodność obliczonej funkcji korelacyjnej ze zmierzoną w eksperymencie [33] — rys. 1.9 (górny) dla małej kropki i subpikosekundowego jej ekscytonowego wzbudzania wydaje się potwierdzać słuszność rozwiniętej teorii. Kanał LA, mimo że energetycznie zaniedbywalny w porównaniu do kanału LO w GaAs, jest najszybszy i najwydajniejszy w procesie defazowania. Kanał LO jest wolniejszy i towarzyszą mu szybkie oscylacje — dudnienia w skali czasowej ~ 100 fs, związane ze szczeliną fononów LO (kanał LO defazowania może być jednak istotnie przy-



Rysunek 1.9. 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 nieadiabatycznie wzbudzonego ekscytonu (impulsem 0,2 ps) [33] jest dobrze odtworzona na górnym rysunku

spieszony w wyniku anharmonicznego rozpadu fononów LO, np. dla GaAs/InAs do poziomu 10 ps) [44]. Defazowanie wywołane przez fonony LO jest znacząco mniejsze niż to wywołane przez fonony LA (odwrotnie niż dla przesunięcia energetycznego). Włączenie kanału LO w zasadzie słabo modyfikuje silne defazowanie przez fonony LA — rys. 1.10 i 1.11. Na rysunku 1.11 (prawy) przedstawiono sposób skalowania czasu defazowania wraz ze zmianą rozmiaru kropki — 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 grupowa fononów, l — rozmiar kropki. Dla fononów LA  $v_g = C_{\rm a}$ , co prowadzi do liniowej zależności od l, natomiast dla fononów LA  $v_g = 2\beta k \sim 2\beta/l$  i uzyskujemy kwadratową zależność od rozmiaru kropki  $\sim l^2/(2\beta)$ . Pełne uzasadnienie tego wyniku podajemy dalej.

### 1.2. Uzasadnienie uniwersalnej metody oszacowania czasu defazowania zlokalizowanych wzbudzeń w nanostrukturach

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 przedstawionym poprzednio schemacie obliczania funkcji korelacyjnej metodami funkcji Greena [31]. Funkcja korelacyjna

$$I(t) = \langle a_0(t)a_0^+(0) \rangle = -\frac{\hbar}{\pi} \int d\omega Im G_r e^{-i\omega t}, \qquad (1.19)$$

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. 1.9, 1.10). Funkcja ta jest odwrotną transformatą Fouriera intensywności spektralnej (rys. 1.6), która wyraża się z kolei przez urojoną część retardowanej komutacyjnej jednocząstkowej funkcji Greena ekscytonu  $G_r$  [15, 16]. Dla krótkich skal czasowych (a zatem dużych częstości fourierowskich  $\omega$ ) urojona część retardowanej funkcji Greena jest proporcjonalna do urojonej części operatora masowego (wynika to z równania (1.17)), który w głównym rzędzie (przy zaniedbaniu wielofononowych efektów) wyraża się zależnością [15, 16]:

$$\gamma \sim \int dk \, |F(k)|^2 \, \delta(\omega - E - \omega(k)), \qquad (1.20)$$

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

$$F(k) \sim \langle \Psi_0 | e^{ikr} | \Psi_0 \rangle, \qquad (1.21)$$

gdzie  $|\Psi_0(r)\rangle$  jest funkcją falową ekscytonu zlokalizowanego w kropce odpowiadającą jego stanowi podstawowemu o energii *E*. Dla prostoty posługujemy się tu jednocząstkowym zlokalizowanym wzbudzeniem, np. elektronem i w jednym wymiarze,  $\hbar = 1$ . Wtedy funkcja korelacyjna

$$I(t) \sim e^{-iEt} \int dr \, |\Psi_0(r)|^2 \int dk F^*(k) e^{i(kr-\omega(k)t)}, \qquad (1.22)$$

okazuje się być zmieniającym się w czasie przekryciem gęstości prawdopodobieństwa zlokalizowanej w kropce cząstki

$$|\Psi_0(r)|^2, (1.23)$$

z opuszczającym obszar cząstki pakietem falowym wzbudzeń kolektywnych (fono-nów)

$$\int dk F^*(k) e^{i\left(r - \frac{\partial \omega(k)}{\partial k}t\right)k}$$
(1.24)

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 F(k). Ten pakiet falowy unosi nadmiarową energię ubieranej cząstki (deformacyjną lub polaryzacyjną) na zewnątrz kropki do otaczającego kryształu, z prędkością grupową  $v_g = \frac{\partial \omega(k)}{\partial k}$  (dla  $k \sim 1/l$ ). Czas defazowania odpowiada zatem czasowi zmniejszania wartości modułu I(t), który okazuje się być tu rzędu  $\tau \simeq \frac{l}{v_g}$ , gdzie l jest uśrednionym po kierunkach rozmiarem kropki (stanu ekscytonu w kropce), co zilustrowano na rys. 1.12 — 1.14).

W tym przedstawieniu czas defazowania jest rzędu stosunku rozmiarów kropki l i prędkości grupowej fononów — prędkości z jaką porusza się pakiet fononów, unoszący nadmiarową energię do otaczającego materiału na zewnątrz kropki kwantowej (jest to ewolucja niestacjonarnego stanu nieadiabatycznie wzbudzonego w kropce gołego ekscytonu). Dla fononów akustycznych (LA) ich prędkość grupowa to stała — prędkość dźwięku  $v_g = C_a$ , co prowadzi do liniowej zależności względem rozmiaru kropki

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

dla fononów optycznych  $v_q = 2\beta k \sim 2\beta/l$ 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 — centrum pakietu w przestrzeni pędów). W przypadku fononów optycznych LO czas defazowania skaluje się zatem kwadratowo z rozmiarem kropki i dla typowych struktur osiąga znacznie większe wartości niż w przypadku defazowania kanałem fononów LA (rys. 1.11).



Rysunek 1.10. Typowy przebieg modułu funkcji korelacyjnej ekscytonu oddziałującego równocześnie z fononami LO i LA. Oscylacje wiążą się ze szczeliną w widmie fononów LO, mają częstość ~  $1/\Omega \sim 100$  fs i są wyraźnie silniejsze dla kropki w wyniku wzrostu efektywnej stałej Fröhlicha (u góry)

## 1.3. Silny wzrost oddziaływania ładunkowych stopni swobody z fononami LO w nanostrukturach

Oddziaływanie elektronu (także dziury lub ekscytonu) z fononami jest przedmiotem pewnej niejednoznaczności w opisie [26] w zależności od sytuacji. Poruszający się w krysztale elektron polaryzuje lokalnie kryształ — czyli wytwarza pakiet falowy fononów optycznych. Tę polaryzację można podzielić na dwie składowe:

- inercyjną, która pozostaje w lokalnym miejscu polaryzacji,
- nieinercyjną, która towarzyszy poruszającemu się elektronowi ją wywołującemu (nadąża za jego ruchem).

Nieinercyjna część chmury polaryzacyjnej powinna być uwzględniona w definicji samego elektronu — jako efektywnej kwazicząstki w krysztale (powinna być uwzględniona w polu krystalicznym). Pozostała inercyjna część polaryzacji oddziałuje z uciekającym elektronem i może być ujęta w postaci 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



Rysunek 1.11. Po lewej: moduł funkcji korelacyjnej przy uwzględnieniu tylko fononów LA (u góry), tylko fononów LO (u dołu). Po prawej: czas defazowania (ubierania ekscytonu) względem uśrednionego rozmiaru kropki l dla kanału LA (u góry) — jest to zależność liniowa i dla kanału LO (u dołu) — zależność kwadratowa od l

oddziaływanie elektron–fonon LO — jest większa. Pasmowy elektron w krysztale porusza się z różną prędkością w zależności od kwazipędu **p**, jego prędkość grupowa (kwaziklasyczna) [27]  $v = \nabla_p E_{\mathbf{p}}$ , gdzie  $E_{\mathbf{p}}$  — zależność dyspersyjna w paśmie, i zmienia się od zera w punkcie  $\Gamma$ , przez maksimum w pośrednich obszarach strefy Brillouina, do zera na granicach strefy. Elektron zlokalizowany w nanokrysztale kropki kwantowej<sup>7</sup> porusza się szybciej — jego prędkość kwaziklasyczna skaluje się odwrotnie proporcjonalnie do rozmiarów liniowych kropki. Jest to tym silniejszy efekt, im mniejsza jest kropka i prowadzi do wzrostu sprzężenia z fononami LO nawet w skali do kilkuset procent.

W celu ilościowego ujęcia tego efektu można przeprowadzić następującą aproksymację. Oddziaływanie elektron–fonon LO wyrazić można ilościowo za pomocą bezwymiarowej stałej materiałowej — stałej Fröhlicha [26, 28]:

$$\alpha_e = \frac{e^2}{\tilde{\epsilon}} \sqrt{\frac{m^*}{2\hbar^3\Omega}},\tag{1.25}$$

 $<sup>^7</sup>$ Na przykład sześcienna kropka o rozmiarach 10 nm typu GaAs byłaby nanokryształem (zwykle zdeformowanym w wyniku naprężeń sieciowych dla kropek samorosnących z niedopasowaniem sieci) o rozmiarach 20  $\times$  20  $\times$  20 komórek elementarnych (stała sieciowa w GaAs  $\simeq$  0,5 nm).



Rysunek 1.12. Zmniejszanie wartości funkcji korelacjnej następuje w wyniku zmniejszania przekrycia lokalnego rozkładu cząstki (ekscytonu) w kropce z unoszącym nadmiarową energię pakietem falowym fononów — funkcja korelacyjna jest przekryciem gęstości prawdopodobieństwa cząstki (ekscytonu) w kropce,  $|\Psi(r)|^2$  (górny lewy) i uciekającego z obszaru kropki pakietu falowego

 $\begin{aligned} \mathcal{A}(r,t) &= \int \int e^{-ikr'} |\Psi(r')|^2 dr' e^{i(r\pm \frac{d\epsilon(|k|)}{d|k|}sign(k)t)k} dk; \text{ na rysunku} \\ \text{przedstawiony } \mathcal{A}(r) \text{ dla kilku kolejnych momentów czasu, } \tau - \text{skala} \\ \text{czasowa defazowania} \end{aligned}$ 

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  $\alpha_e = 0,07$ , co jest dobrze zweryfikowane eksperymentalnie w GaAs *bulk* [42]. Dla elektronu zlokalizowanego w kropce kwantowej (np. GaAs/InAs) raportowany jest silny wzrost  $\alpha_e$  [25,29]. Z niedawnych pomiarów pochłaniania przez kropkę dalekiej podczerwieni zaobserwowano dwukrotny wzrost rozszczepienia (*anticrossing*) polaronowego widma absorpcji podczerwieni w polu magnetycznym [29], co wskazuje na dwukrotny wzrost stalej Fröhlicha w kropce,  $\alpha_e \sim 0,15$  (dla kropki o rozmiarach  $\sim 10$  do 15 nm). Dla mniejszych kropek zaobserwowano jeszcze większy wzrost efektywnej stałej  $\alpha_e$  [46,47] na podstawie pomiaru współczynnika Huanga–Rhysa [24]. Współczynnik ten wyraża stosunek intesywności piku satelickiego (LO) do głównego piku


Rysunek 1.13. Kinetyka pakietu falowego fononów LA,  $\mathcal{A}(r,t) = \int \int e^{-ikr'} |\Psi(r')|^2 dr' e^{i(r \pm \frac{de(|k|)}{d|k|} sign(k)t)k} dk \text{ (w modelu 1D)}$ opuszczającego obszar kropki kwantowej w wyniku oddziaływania ekscyton–fonony LA — wyraźnie widoczna stała prędkość grupowa pakietu

fotoluminescencyjnego widma PL — wzrost piku satelickiego LO dobrze widoczny jest na rys. 1.15. Wzrost ten tłumaczymy poprzez opisaną koncepcję nieadiabatycznej korekty oddziaływania elektron-fonon LO.

Przypomnijmy, że *nieinercyjna* część polaryzacji lokalnej wywołanej przez elektron w sieci, która nadąża za jego ruchem, wliczona już jest do pola krystaliczego definiującego elektron. Dlatego *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 wysokoczęstościowej polaryzacji (termin 'wysokoczęstościowy' odnosi się tu do częstości dużo większych niż fononowe, ale mniejszych



Rysunek 1.14. Kinetyka pakietu falowego fononów LO,  $\mathcal{A}(r,t) = \int \int e^{-ikr'} |\Psi(r')|^2 dr' e^{i(r \pm \frac{d\epsilon(|k|)}{d|k|} sign(k)t)k} dk \text{ (w modelu 1D)}$ opuszczającego obszar kropki kwantowej w wyniku ubierania ekscytonu w fonony LO — na kolejnych rysunkach skale czasowe podano w proporcji 1:3:5

niż częstości atomowe), **D** jest indukcją elektrostatyczną,  $\mathbf{P}(\mathbf{r}) = \mathbf{D}/(4\pi\tilde{\epsilon})$ , co prowadzi następnie [26, 28] do formuły (1.25) na stałą Fröhlicha.

Dla elektronu uwięzionego w kropce inercyjna część polaryzacji jest większa w porównaniu do sieciowego elektronu. Dolna granica kwaziklasycznej prędkości elektronu w kropce o rozmiarach d wynosi  $v_d \simeq \hbar/(m^*d)$  i jest większa, zwłaszcza w porównaniu do elektronów sieciowych w pobliżu punktu  $\Gamma$ , w którym to punkcie jest ona zerowa. Dlatego *inercujna* cześć polaryzacji dla elektronu w kropce wzrasta — ucieka on skuteczniej przed chmurą polaryzacyjna. Jeśli parametr ograniczenia dynamiki d osiągnie skalę atomową a (a jest rozmiarem komórki elementarnej), to dolna granica prędkości kwaziklasycznej elektronu osiąga atomową skalę  $v_d = v_a \simeq \hbar/(m^*a)$ . W takim przypadku *inercyjna* lokalna polaryzacja wynosi  $\mathbf{P}_0$ . Jeśli zatem 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, to możemy napisać dla tej polaryzacji:  $\mathbf{P}'(\mathbf{r}) = \mathbf{P}_0(\mathbf{r}) - \eta \mathbf{P}_\infty(\mathbf{r})$ , gdzie czynnik  $\eta \ (0 \leq \eta \leq 1)$ zależy od skali lokalizacji elektronu. Jest jasne, że  $\eta = 1$ , kiedy  $d \to \infty$  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 dieelektryczną  $\tilde{\epsilon'}$ ,

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

Ta formuła prowadzi do zrenormalizowanej stałej Fröhlicha (1.25) z  $\tilde{\epsilon}$  zamienioną przez  $\tilde{\epsilon'}$ .



Rysunek 1.15. 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 intensywmności piku centralnego wyraża współczynnik Huanga–Rhysa [24]

Dodatkowa niewielka korekta wynikać może jeszcze ze zmiany masy efektywnej w nanostrukturze na skutek mieszania materiałów i efektów naprężeń w kropce samorosnącej InAs/GaAs. Z modelowych badań teoretycznych wpływu naprężenia [45] w takich kropkach, o rozmiarach podobnych do analizowanych tutaj, wynika że  $m^* \simeq 0.05 m_e$ . Ta zmiana masy efektywnej nie powoduje istotnej poprawki do  $\alpha_e$ , ponieważ zmiana w stosunku do wartości dla GaAs-*bulk*,  $m^* \simeq 0.067 m_e$ , jest niewielka, a  $\alpha_e \propto \sqrt{m^*}$ , co prowadzi do czynnika korekcyjnego  $\simeq 0.9$ , (zostało to zaznaczone na rys. 1.16).

Dla kropek InAs/GaAs QD o promieniu rzędu 10 nm (i.e.  $d \approx 20$  nm), zrenormalizowana stała Fröhlicha  $\approx 0.15$  jest w bardzo dobrej zgodności z danymi spektroskopii (*FIR spectroscopy*) [29]. Wzrost oddziaływania elektron-fonon LO prowadzi do silnego wzrostu parametru Huanga–Rhysa [24], opisującego wzrost intesywności satelickiego piku LO w widmie fotoluminescencji kropek (InAs/GaAs) [46,47] — rys. 1.15. Parametr Huanga–Rhysa skaluje się jak  $\alpha_e$ . Dodatkowe korekty wynikają z różnicy stałej Fröhlicha dla elektronu i dziury tworzących ekscyton, które mają różne masy efektywne. Dla kropek o średnicy ~ 5–9 nm [47], odpowiednie  $\alpha_e \sim 0.4$ –0,3, a dla kropek o średnicy ~ 15–19 nm [46],  $\alpha_e \sim 0.25$ –0,18. W pierwszym przypadku prowadzi to do czynnika 6–5, a w drugim 4–3 dla renormalizacji parametru Huanga–Rhysa, co dobrze odpowiada danym doświadczalnym (rys. 1.16).



Rysunek 1.16. 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 [46], otwarte okręgi — dane dla ekstremalnie małej kropki 5–9 nm [47] (z parametru Huanga–Rhysa), kwadrat — dane z pochłaniania podczerwieni w polu magnetycznym [29]

#### 1.4. Czasowe ograniczenie spinowej blokady Pauliego przez defazowanie fononowe

Defazowanie orbitalnych stopni swobody w kropkach kwantowych poprzez fonony z otoczenia powoduje też efekty natury spinowej. Inercja procesu tworzenia polaronu — ubierania 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 na rys. 1.17). Spinowa blokada Pauliego może być jednak czasowo uchylona w pewnym stopniu, jeśli elektron znajdujący się w kropce jest już ubrany w chmurę fononową — jest wtedy polaronem, inną czastką (kwaziczastką) niż goły elektron, który może być wzbudzany nieadiabatycznie (tzn. szybko) do kropki. Różnica między tymi dwoma cząstkami: polaronem i gołym elektronem to chmura fononowa polaronu, jest ona wystarczająca by uchylić w pewnym stopniu blokadę Pauliego. Dla polaronów w kropkach powoduje ona uchylenie blokady w granicach 10%, tzn. wzbudzony nieadiabatycznie goły elektron w około 10% zmieści się na stanie kwantowym w kropce już zajętym przez polaron o takim samym spinie. Po upływie czasu defazowania — czyli ubierania elektronu w chmurę fononów — zostanie on jednak w całości wyrzucony z tego stanu, zgodnie z zasadą Pauliego.



Rysunek 1.17. Schematyczne przedstawienie czasowego ograniczenia spinowej blokady Pauliego w kropkach kwantowych w wyniku defazowania ładunków przez fonony: nieadiabatycznie (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)

Efekt czasowego naruszania dokładności blokady Pauliego powoduje błąd kwantowych procedur typu *spin-charge conversion* potrzebnych dla hybrydowych rozwiązań bramek kwantowych [51], w których proponuje się szybkie przetwarzanie (sterowanie splątaniem qubitów) na orbitalnych stopniach swobody w kropkach, a przechowywanie na odporniejszych spinowych qubitach. Do realizacji takich rozwiązań potrzebna jest jednak bezstratna informacyjnie i szybka procedura zamiany qubitu spinowego na ładunkowy, co można zrealizować poprzez wykorzystanie spinowej blokady Pauliego. Zauważone przez nas ograniczenie czasowe tej blokady powoduje konieczność silnego spowolnienia zamiany qubitów (charge-spin conversion), do skali czasowej dłuższej niż czas defazowania elektronu w kropce (tj. rzędu co najmniej 10 ps). Takie spowolnienie likwiduje raczej przewagi tego hybrydowego rozwiązania [51] nad innymi lokalnymi schematami przetwarzania informacji kwantowej w kropkach, również silnie ograniczonych przez opisane procesy dekoherencji fazowej. Zamiana qubitów (charge-spin conversion) w schemacie spinowej blokady Pauliego (rys. 1.17) może być bezstratnie realizowana tylko w stosunkowo powolnym reżimie adiabatycznym.

#### Rozdział 2

### Dekoherencja spinowych stopni swobody w kropkach kwantowych

Dynamiczne efekty związane z dodatkowymi podukładami, takimi jak fonony w stosunku do orbitalnych stopni swobody kropek, prowadzą do hybrydyzacyjnych efektów, które są przyczyną dekoherencji fazowej opisanej w poprzedniej części w przypadku ładunków w kropkach. Spinowe stopnie swobody nie oddziałują bezpośrednio z fononami — słabe oddziaływanie łączy spinowe stopnie swobody nośników uwięzionych w kropkach z drganiami sieci przez ich związek z orbitalnymi (ładunkowymi) stopniami swobody

— sprzężenie spin–orbita [48],

— reguły typu Hunda dla kropek wieloelektronowych [1] — zapełnianie kolejnych powłok w wieloelektronowych kropkach związane jest z całkowitym spinem elektronów (dziur) danej powłoki<sup>1</sup>, co w efekcie wiąże spinowe i orbitalne stopnie swobody.

Słabe sprzężenie spinu z fononami powoduje, że można oczekiwać, że spin elektronu uwięzionego w kropce kwantowej będzie dostatecznie dobrze odizolowanym układem kwantowym (niewielkie oddziaływanie spin–orbita jest powodem bardzo powolnej dekoherencji spinu, podobnie jak oddziaływanie ze spinami jądrowymi), by związać z nim qubit i oczekiwać wypełnienia kryteriów DiVincenzo [7, 8, 22]. Z powodu niewielkich wpływów otoczenia koherencja spinu w kropkach kwantowych utrzymuje się aż do czasów rzędu µs [20]. Problem jednak pojawia się tu z możliwością implementacji oscylacji Rabiego (operacji jednoqubitowych). Ze względu na małą wartość współczynnika giromagnetycznego w półprzewodnikach, sterowanie spinowym qubitem (rozpiętym na dwóch orientacjach spinu w zewnętrznym stałym polu magnetycznym) poprzez oscylacje Rabiego jest tu bardzo powolne i ponownie trudno jest spełnić kryteria DiVincenzo (człon Pauliego,  $g\mu_Bs_zB$ , prowadzi do niewielkiego rozszczepienia Zeemana o wartości zaledwie 0,03 meV/T, w GaAs).

Z operacjami dwuqubitowymi dla spinowych qubitów nie ma tego problemu istnieje bardzo udany schemat włączania i wyłączania oddziaływania spinowych qubitów [20,22] — a więc sterowania ich splątaniem w skali czasowej rzędu piko-

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Uogólnienie stanów singletowych i trypletowych.

sekund. Koncepcja sterowania oddziaływaniem wiąże się z oddziaływaniem wymiennym dwóch spinów, które jest pochodzenia orbitalnego (wiąże się z kulombowskim oddziaływaniem) [49] — jest różnicą energii stanu singletowego i trypletowego tych spinów [49], i co za tym idzie jest rzędu kilkudziesięciu meV, co prowadzi do pikosekundowej skali czasowej sterowania splątaniem qubitów. Idea tego sterowania wykorzystuje związek singletowej i trypletowej struktury spinowej pary elektronów (każdy w swojej kropce, ale położonych dostatecznie blisko, by można mówić o i ich nierozróżnialności kwantowej<sup>2</sup>) z ich strukturą orbitalną. Z fermionowej natury elektronów wynika, że

— stan singletowy  $\frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow>_1\otimes|\downarrow>_2-|\downarrow>_1\otimes|\uparrow>_2) \Longleftrightarrow |0,0>$  musi wiązać się z symetryczną funkcją orbitalną,

$$- \text{ stan trypletowy} \left\{ \begin{array}{ccc} |\uparrow>_1 \otimes |\uparrow>_2 & \Longleftrightarrow & |1,-1>\\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow>_1 \otimes |\downarrow>_2 + |\downarrow>_1 \otimes |\uparrow>_2) & \Leftrightarrow & |1, & 0>\\ |\downarrow>_1 \otimes |\downarrow>_2 & & \Leftrightarrow & |1, & 1> \end{array} \right\}$$

musi się wiązać z antysymetryczną funkcją orbitalną, tak by pełna spinowo-orbitalna funkcja była antysymetryczna, jak powinno być dla fermionów. Bez obecności pola magnetycznego stan singletowy jest podstawowy [49], ale wraz ze wzrostem pola<sup>3</sup> staje się on coraz mniej wygodny i preferowany jest stan trypletowy (z równoległym ustawieniem spinów)<sup>4</sup>. Dla pola krytycznego (jest ono rzędu kilku T dla kropek kwantowych) oba stany, singletowy i trypletowy, mają tę samą energię, co oznacza wyłączenie oddziaływania wymiennego qubitów (stała oddziaływania wymiennego wyraża się przez różnicę energii singletu i trypletu) [49]. Można je znowu włączyć, zmieniając wartość przyłożonego zewnętrznego pola magnetycznego i wyprowadzając układ z punktu degeneracji. Oddziaływanie wymienne, które jest równe różnicy energii (orbitalnej) stanu trypletowego i singletowego zmienia się w zakresie do kikudziesięciu meV, co pozwala na szybkie splątanie qubitów. Można tu dodać, że poszukiwano też możliwości wykorzystania tego wymiennego oddziaływania do implementacji i sterowania pojedynczych qubitów. W tym aspekcie podane zostały dwa rozwiązania:

— zdefiniowanie qubitu na stanach singlet i tryplet w kropce dwuelektronowej typu He [50],

— zdefiniowanie qubitu na stanach spinowych z  $S_z = \pm 1/2$  trzech elektronów [20], ale oddzielonych energetycznie silnym oddziaływaniem typu wymiennego — para  $|1/2, -1/2 \rangle_s$ ,  $|1/2, 1/2 \rangle_t$  lub para  $|1/2, 1/2 \rangle_s$ ,  $|1/2, -1/2 \rangle_t$ . Stany

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Musi być przekrycie ich zlokalizowanych funkcji falowych.

 $<sup>^{3}\,</sup>$ Pole magnetyczne łamie symetrię na odbicie czasu.

<sup>&</sup>lt;sup>4</sup> Należy tu podkreślić, że równoległe ustawienie spinów preferowane jest też przez człon Pauliego, człon ten jest jednak bardzo mały, a trypletowy stan spinowy preferowany jest raczej dlatego, że w obecności łamiącego symetrię na odbicie czasu pola magnetycznego, orbitalny stan antysymetryczny minimalizuje energię oddziaływania kulombowskiego [49].

spinowe 3 elektronów można sklasyfikować według reguł dodawania spinu: najpierw dodajemy 2 spiny 1/2 i otrzymujemy singlet |0, 0 > i tryplet  $\begin{cases} |1, -1 > \\ |1, 0 > \\ |1, 1 > \end{cases}$ ,

następnie dodajemy trzeci spi<br/>n1/2otrzymując8trzy<br/>elektronowych stanów spi-

nowych 
$$\left\{ \begin{array}{ll} |1/2, -1/2 \rangle_s & |1/2, 1/2 \rangle_s \\ |3/2, -3/2 \rangle_t & |3/2, -1/2 \rangle_t & |3/2, 1/2 \rangle_t \\ |1/2, -1/2 \rangle_t & |1/2, 1/2 \rangle_t \end{array} \right\}$$

W obu przypadkach potrzeba jednak zwielokrotnić liczbę cząstek dla kolektywnej definicji qubitu, co z jednej strony prowadzi do wzrostu dekoherencji lokalnej ~  $e^N$ , ale z drugiej może być dobrym kierunkiem rozwoju w kierunku kolektywnych-globalnych (i przez to odporniejszych na dekoherencję podprzestrzeni przestrzeni Hilberta wielocząstkowych układów [14]).

W schemacie sterowania splątaniem qubitów wykorzystuje się związek spinowego oddziaływania wymiennego z orbitalnymi stanami i zatem z silnym kulombowskim oddziaływaniem elektronów (rozdzielającym w skali meV stany singletowy od trypletowego). Na skutek związania w ten sposób spinowego oddziaływania wymiennego z silnym oddziaływaniem kulombowskim, czasy unitarnych operacji dwuqubitowych mogą być bardzo krótkie (rzędu pikosekund), co właśnie czyni spinowe stopnie swobody atrakcyjnymi dla zastosowań w informatyce kwantowej. Model bramki kwantowej zorganizowanej według powyższego schematu zaproponował DiVincenzo [20–22] dla pary kropek kwantowych typu H (z jednym elektronem i qubitem  $|1/2, -1/2 \rangle$ ,  $|1/2, 1/2 \rangle$ ). Dla implementacji komputera kwantowego niezbędne są jednak też jednoqubitowe operacje, te jednakże, jak wspominaliśmy, są bardzo powolne.

Można rozważyć próbę przyspieszenia jednoqubitowych operacji spinowych. Nasza propozycja [38] polega na wykorzystaniu silnego wzmocnienia współczynnika giromagnetycznego w półprzewodnikach domieszkowanych magnetycznie (tzw. półprzewodnikach półmagnetycznych) [52–58], w ich fazie uporządkowanej magnetycznie. W takich materiałach, o niewielkiej (kilkuprocentowej) zawartości magnetycznych jonów, zwykle manganu, dochodzi do przejścia do fazy magnetycznie uporządkowanej, na skutek magnetycznej pośredniczącej roli pasmowych dziur [55]. Przejście to występuje w temperaturach nawet powyżej 100 K (w Ga(Mn)As) [55,56] i może być dodatkowo sterowane koncentracja dziur w półprzewodniku [53, 54, 59–61]. Magnetyczne uporządkowanie powoduje powstanie w materiale wewnetrznego pola magnetycznego typu pola Weissa o wielkiej wartości — pole to działa wyłacznie na spinowe stopnie swobody (nie działa orbitalnie) i w ten sposób bardzo silnie wzmacnia człon Pauliego, czyli współczynnik giromagnetyczny. Zatem w kropkach umieszczonych w półprzewodniku półmagnetycznym (a takie struktury są już ostatnio wytwarzane) można by znacznie przyspieszyć operacje jednoqubitowe, do poziomu wymaganego przez kryteria DiVincenzo.

Pojawia się tu jednak dodatkowy problem — włączenie nowego podukładu spinowego, jakim jest magnetyczna część domieszkowanego półprzewodnika. Ten podukład wprowadza duży rezerwuar wzbudzeń kolektywnych — fal spinowych, które bezpośrednio oddziałują ze spinami qubitów. Fale spinowe (magnony) przejmują w tym układzie rolę fononów i prowadzą do podobnych efektów dekoherencji, jak fonony w odniesieniu do ładunkowych stopni swobody w kropkach (co było przedstawione w poprzednim rozdziale).

Dokładniejsza analiza tego problemu — jak przedstawimy poniżej — pokazuje, że fale spinowe rzeczywiście wywołują szkodliwą dekoherencję i to w czasie rzędu 500–1000 ps, a więc znowu wyjątkowo niekorzystnie z punktu widzenia możliwości konstrukcji spinowej bramki logicznej komputera kwantowego (znowu w samym środku okna 6 rzędów między czasem sterowania a dekoherencją amplitudową [62]).

Istotne elementy tej analizy to: (1) uśrednienie po losowych położeniach domieszek [64], co pozwala na znalezienie finalnie widma fal spinowych w reprezentacji Holsteina–Primakoffa [65, 66] (uśrednienie pozwala na przywrócenie efektywnie translacyjnej niezmienniczości [64] i wykorzystanie reprezentacji pędowej), (2) określenie dyspersji fal spinowych w zależności od koncentracji dziur i domieszek magnetycznych, (3) określenie struktury oddziaływania fal spinowych ze spinem ekscytonu w kropce. Otrzymana w wyniku tej analizy kwadratowa dyspersja fal spinowych jest istotnym uwarunkowaniem szybkości wywoływanej przez nie dekoherencji fazowej. Jeśli posłużyć się oceną czasu tego procesu, jako rozmiaru kropki podzielonej przez prędkość grupową fal spinowych ( $v_g = \nabla \epsilon$  ( $\mathbf{p}$ ) ~  $p \sim \frac{\hbar}{d}$ ),  $\tau \sim \frac{d}{1/d} \sim d^2$ , skaluje się jak kwadrat rozmiaru kropki (oznaczanego przez d) podobnie jak dla fononów LO (czyli szybko rośnie z rozmiarem kropki) i dla typowych kropek rozmiaru około 10 nm osiąga wartość rzędu 500 ps.

Ta niekorzystna zbieżność ocen dekoherencji fazowej, która zarówno dla orbitalnych, jak i spinowych stopni swobody w kropkach kwantowych (w tym ostatnim przypadku — w półmagnetycznych półprzewodnikach) lokuje się pośrodku okna 6 rzędów między czasem operacji a czasem dekoherencji amplitudowej relaksacji<sup>5</sup>, i w ten sposób wydaje się wykluczać raczej możliwości implementacji skalowanych bramek z korektą błędów (czyli budowy dużego komputera kwantowego w technologii kropek), jest być może przejawem głębszej — niesformułowanej jeszcze do końca — prawidłowości, że rezultaty odzwierciedlają za-

 $<sup>^5\,</sup>$ Można zauważyć, że relaksacja ekscytonu ma charakter markowski, tj. bez pamięci, podczas gdy defazowanie ekscytonu jest procesem niemarkowskim, tj. z pamięcią — zależy od stanu wyjściowego [67].

sadniczy fakt, iż 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) [14], wydaje się, że dla konstrukcji skalowanego (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 [18, 19].

Innym kierunkiem rozważań możliwej implementacji kwantowej bramki logicznej w technologii nanostruktur ciałostałowych jest rozwiązanie hybrydowe [51] — przechowywanie informacji w stosunkowo odpornych na dekoherencję qubitach spinowych, natomiast operacje logiczne (zwłaszcza jednoqubitowe) proponuje się przeprowadzać na szybkich orbitalnych stopniach swobody nanostruktur. Potrzebna jest tu jednak bezstratna informacyjnie i szybka procedura konwersji między ładunkowymi i spinowymi stopniami swobody (*spin-charge qubit conversion*). Jak zostało to przedstawione, szybka procedura *spin-charge qubit conversion*, oparta na spinowej blokadzie Pauliego, obarczona jest jednak dużym błędem i dla zachowania wierności musiałaby być przeprowadzana adiabatycznie, czyli stosunkowo wolno, co również wydaje się wykluczać możliwość skalowania rozwiązań hybrydowych. Opisane duże ograniczenie czasowe w schemacie konwersji spin–ładunek nie zostało uwzględnione w oryginalnych projektach [51].

Należy zatem podkreślić, że w każdym z rozważanych przypadków koherentnej inżynierii stanów kwantowych w kropkach kwantowych (orbitalnych i spinowych) napotykamy duże ograniczenia, nie wskazujące na prostą możliwość skalowania w celu implementacji korekty błędów. Mimo tego ograniczenia intensywne prace eksperymentalne (potwierdzające przedstawione tu rozważania) prowadzone są w przypadku kropek kwantowych, zarówno na ich ładunkowych, jak i spinowych stopniach swobody. Łatwiejsze technicznie są metody optycznego sterowania ładunkami i dlatego zademnostrowano już oscylacje Rabiego na ekscytonowych qubitach kropkowych [68–70], także splątanie stanów ekscytonowych (chociaż niesterowane) [71]. Należy też dodać, że rozpoznanie dekoherencji w nanostrukturach ma podstawowe znaczenie dla rozwoju mniej wymagających technik informatyki kwantowej, m.in. kryptografii kwantowej [72], gdzie niepotrzebne jest spełnienie wszystkich kryteriów DiVincenzo [7, 8, 73] — Dodatek A.

#### 48

## 2.1. Modelowy opis półprzewodnika półmagnetycznego (DMS) — fale spinowe

Ferromagnetyzm indukowany przez pasmowe nośniki [52,53] w półmagnetycznych półprzewodnikach [54–58, 60, 61] (DMS, diluted magnetic semiconductor) odnosi się m.in. do p-domieszkowanych półprzewodników typu  $III_{1-x}Mn_xV$  (np.  $Ga_{1-x}Mn_xAs$ ) i II<sub>1-x</sub>Mn<sub>x</sub>VI (np. Zn<sub>1-x</sub>Mn<sub>x</sub>Se), w których kationy są częściowo zastapione jonami metalu przejściowego (głównie Mn<sup>2+</sup>). Własności tych materiałów opisane sa szeroko za pomoca różnych wariantów teorii średniego pola, właczając modyfikacje modelu RKKY [55–58,60] (Ruderman–Kittel–Kasuya–Yosida) — opisuja one dobrze ferromagnetyczne uporządkowanie w DMS [55,60,74,75], ale prowadza zwykle do zawyżonych ocen teoretycznych stabilności uporzadkowanej fazy. Fluktuacje termiczne i kwantowe, które niszcza daleki porzadek i prowadza do obniżenia temperatury krytycznej moga być opisane przy wykorzystaniu metody całek funkcjonalnych w schemacie RKKY [76–78], oraz rozmaitych procedur numerycznych, np. numeryczne przybliżenie faz chaotycznych RPA [79] (random phase approximation) lub metody Monte-Carlo [80]. W celu teoretycznego opisania spinowego układu w DMS przyjmuje się model wymiennego oddziaływania spinów domieszek za pośrednictwem spinów dziur pasmowych [55, 60, 76, 77]. Oddziaływanie wymienne typu p-d pomiędzy magnetyczna domieszka i dziura prowadzi do ferromagnetycznego uporzadkowania magnetycznych domieszek. Pasmowe dziury uczestniczące w tym oddziaływaniu wzmacniają silnie ferromagnetyczne skośne oddziaływanie wymienne domieszek, które dominuje nad poczatkowo antyferromagnetycznym oddziaływaniem wymiennym prostym samych domieszek [54]. To skośne sprzeżenie dla niewielkiej nawet koncentracji dziur (mniejszej niż koncentracja domieszek) jest na tyle silne, że temperatura krytyczna przejścia ferromagnetycznego w DMS osiąga duże wartości (szczególnie wysokie,  $T_c \sim 110$ K, dla Ga<sub>0.947</sub>Mn<sub>0.053</sub>As [55, 81, 82], a nawet wyższe dla GaN domieszkowanego Mn [83, 84]). Należy dodać, że w materiałach  $III_{1-x}Mn_xV$ , atomy Mn są równocześnie magnetycznymi domieszkami i płytkimi akceptorami (dostarczającymi pośredniczących dziur pasmowych) i stąd wynika stosunkowo wysoka temperatura krytyczna w tych materiałach [55] i kwazimetaliczny stan kolektywny dziur w niskich temperaturach. W materiałach  $II_{1-x}Mn_xVI$  Mn-domieszki nie są akceptorami i dodatkowe p-domieszkowanie jest konieczne, z możliwym niemetalicznym zachowaniem dziur w niskich temperaturach (w przypadku głębszych akceptorowych centrów). Uwzglednienie roli pośredniczacych dziur było szeroko badane w szczególności dla  $Ga_{1-x}Mn_xAs$  [76–78, 80, 85] w sformułowaniu całek funkcjonalnych, poprzez wycałkowanie dziurowych stopni swobody w celu opisania efektywnego modelu spinowego układu i oszacowanie magnetyzacji w T = 0 [76], jak i roli spinowych fluktuacji [78, 79], wzbudzeń Stonera [77], zarówno w niskich, jak i w wysokich temperaturach (głównie metodami numerycznymi, lub półnumerycznymi).

Poniżej przedstawimy rozwinięty przez nas [62] opis DMS w niskich temperaturach w całkowicie analitycznym sformułowaniu i opiszemy niskotemperaturowe własności termodynamiczne DMS, oraz efektywne wzbudzenia spinowe — fale spinowe, po uwzględnieniu nieporządku domieszkowanej struktury. Istotnym wynikiem jest tu analityczne przedstawienie dyspersji fal spinowych w DMS, co pozwoli na określenie ich wkładu do niskotemperaturowej termodynamiki DMS i dekoherencji spinów nośników zlokalizowanych w kropce kwantowej w otoczeniu DMS, oraz porównanie tych charakterystyk z dostępnymi danymi eksperymentalnymi [86–88] w celu weryfikacji modelu.

Spin magnetycznej domieszki — atomu przejściowego metalu — składa się z Z niesparowanych spinów z d-powłoki i maksymalny rzut spinu wynosi S = Z/2 (dla Mn, S = 5/2). W przypadku rozpatrywanych DMS koncentracja magnetycznych domieszek jest mała (rzędu kilku procent) i zakładamy ich przypadkowy rozkład w krysztale [75]. Dla uproszczenia przyjmujemy tylko możliwe podstawieniowe położenia, zaniedbując ewentualne pozasieciowe międzywęzłowe wtrącenia.

Hamiltonian opisujący układ DMS ma postać [54, 55, 76, 77]:

$$\hat{H} = \hat{H}_s + \hat{H}_p, \tag{2.1}$$

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

$$\hat{H}_{s} = -g_{p}\mu_{B}B\sum_{j=1}^{N_{p}} s_{zj} - g_{0}\mu_{B}B\sum_{\mathbf{n}} S_{z\mathbf{n}} - 2\sum_{j=1}^{N_{p}} \sum_{\mathbf{n}} A_{p} \left(\mathbf{R}_{j} - \mathbf{R}_{\mathbf{n}}\right) \hat{\mathbf{s}}_{j} \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{n}}, \quad (2.2)$$

tutaj  $\hat{\mathbf{s}}_j, \mathbf{R}_j$  i  $\hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{n}}, \mathbf{R}_{\mathbf{n}}$  są operatorami spinu i położeniem *j*-tej dziury i **n**-tego atomu domieszki (w punkcie sieci  $\mathbf{R}_{\mathbf{n}}$ );  $A_p(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_{\mathbf{n}})$  jest całką wymiany p - d;  $A_p(\mathbf{R}) < 0$  (antyferromagnetycznego typu) i  $|A_p(\mathbf{R})| \sim 1$ eV;  $g_p$  i  $g_0$  są czynnikami Landego (giromagnetycznymi) dla dziury pasmowej i dla atomu domieszki;  $\mu_B = \frac{\hbar |e|}{2m_0 c}$  — magneton Bohra; sumowanie po **n** przebiega po zajętych przez domieszki węzłach; koncentracja dziur  $x_p = \frac{N_p}{N}$ , koncentracja domieszek magnetycznych  $x = \frac{N_i}{N}, N_p$  — liczba pasmowych dziur, które uczestniczą w wymianie spinowej,  $N_i$  — liczba magnetycznych domieszek, N — liczba komórek elementarnych w krysztale DMS (zauważmy, że często nie wszystkie nominalne domieszki uczestniczą w magnetycznym uporządkowaniu, dlatego x jest pewną efektywną wartością [87]).

 $\hat{H}_p$  jest fermionowym hamiltonianem dziur. Jest on przedmiotem modelowania struktury DMS różnych typów (np. w III(Mn)V, jony Mn<sup>2+</sup> są równocze-

śnie centrami akceptorowymi, a w II(Mn)VI dodatkowe centra akceptorowe muszą być uwzględnione). Dla Ga(Mn)As wyczerpująca dyskusja postaci dziurowego hamiltonianu w DMS została przeprowadzona w modelu 6-pasmowym typu Kohna–Luttingera [76,77] dla pasm walencyjnych i po uwzględnieniu nieparaboliczności (studia typu Monte-Carlo) [77,80,85]. W celu zachowania w pełni analitycznego sformułowania musimy się tu ograniczyć do jednopasmowego modelu dziur, odwołując się do granicznych typów niskotemperaturowego ich zachowania: — dla płytkich akceptorów — kwazimetaliczny stan podstawowy dziur (skolek-

tywizowane dziury) (T = 0),

— dla głębszych akceptorów — izolatorowy stan podstawowy dziur (zlokalizowane dziury) (T = 0).

W ostatnim 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 (o większej koncentracji,  $x_p < x$ ). W przypadku silnej lokalizacji dziur model (2.2) można traktować jedynie jako grube przybliżenie z całką wymiany pomniejszoną o czynnik  $\ll 1$ .

## 2.1.1. Uśrednienie po przypadkowych rozkładach domieszek magnetycznych i akceptorów w DMS

Przedmiotem zainteresowania jest niskotemperaturowe zachowanie DMS, tj. wzbudzenia niskoenergetyczne. Jeśli założyć, że stan podstawowy spinów domieszek odpowiada ich ułożeniu wzdłuż kierunku pola magnetycznego [76], wtedy  $\hat{S}_{+\mathbf{n}} = \sqrt{2S - \hat{B}_{\mathbf{n}}^{+} \hat{B}_{\mathbf{n}}} \hat{B}_{\mathbf{n}} \simeq \sqrt{2S} \hat{B}_{\mathbf{n}}, \hat{S}_{-\mathbf{n}} = \hat{B}_{\mathbf{n}}^{+} \sqrt{2S - \hat{B}_{\mathbf{n}}^{+} \hat{B}_{\mathbf{n}}} \simeq \sqrt{2S} \hat{B}_{\mathbf{n}}^{+}, \hat{S}_{z\mathbf{n}} = -S + \hat{B}_{\mathbf{n}}^{+} \hat{B}_{\mathbf{n}}, \text{ gdzie } \hat{B}_{\mathbf{n}}^{(+)}$  oznaczają operatory bozonowe Holsteina–Primakoffa [65,66] (HP) dla domieszek ( $\hat{S}_{\pm\mathbf{n}} = \hat{S}_{x\mathbf{n}} \pm i \hat{S}_{y\mathbf{n}}$ ). Zakładamy także [76], 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 dobrze przybliża stan podstawowy [76,77] spinowego podukładu dziur(podobnie jak w ferrimagnetyku). Zatem  $\hat{s}_{+j} = \sqrt{1 - \hat{b}_j^+ \hat{b}_j \hat{b}_j} \simeq \hat{b}_j, \hat{s}_{-j} = \hat{b}_j^+ \sqrt{1 - \hat{b}_j^+ \hat{b}_j} \simeq \hat{b}_j^+, \hat{s}_{zj} = \frac{1}{2} - \hat{b}_j^+ \hat{b}_j$ , gdzie  $\hat{b}_j^{(+)}$  — 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:

$$\hat{H}_{s} = E_{s} + \sum_{\mathbf{n}} P_{\mathbf{n}} \hat{B}_{\mathbf{n}}^{\dagger} \hat{B}_{\mathbf{n}} + \sum_{j=1}^{N_{p}} Q_{j} \hat{b}_{j}^{\dagger} \hat{b}_{j} - \sum_{j=1}^{N_{p}} \sum_{\mathbf{n}} C_{j,\mathbf{n}} \left( \hat{b}_{j} \hat{B}_{\mathbf{n}}^{\dagger} + \hat{b}_{j}^{\dagger} \hat{B}_{\mathbf{n}} \right), \quad (2.3)$$

gdzie:

$$P_{\mathbf{n}} = -g_{0}\mu_{B}B - \frac{v_{0}}{(2\pi)^{3}}\int \tilde{A}_{p}\left(\mathbf{k}\right)\sum_{j}e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_{j}-\mathbf{R}_{n})}d^{3}k,$$

$$Q_{j} = g_{p}\mu_{B}B - 2S\frac{v_{0}}{(2\pi)^{3}}\int \tilde{A}_{p}\left(\mathbf{k}\right)\sum_{\mathbf{n}}e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_{j}-\mathbf{R}_{n})}d^{3}k,$$

$$C_{j,\mathbf{n}} = \sqrt{2S}\frac{v_{0}}{(2\pi)^{3}}\int \tilde{A}_{p}\left(\mathbf{k}\right)e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_{j}-\mathbf{R}_{n})}d^{3}k,$$

$$E_{s} = g_{0}\mu_{B}SN_{i}B - g_{p}\mu_{B}N_{p}B/2$$

$$+S\frac{v_{0}}{(2\pi)^{3}}\int \tilde{A}_{p}\left(\mathbf{k}\right)\sum_{j=1}^{N_{p}}\sum_{\mathbf{n}}e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_{j}-\mathbf{R}_{n})}d^{3}k,$$

$$(2.4)$$

 $E_s$  jest energią stanu podstawowego spinowego podukładu DMS;

$$\tilde{A}_{p}\left(\mathbf{k}\right) = \frac{1}{v_{0}} \int d^{3}k A_{p}\left(\mathbf{R}\right) \exp\left(-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}\right),$$

 $(v_0\,=\,V/N\,-$ objętość komórki elementarnej).

Położenia domieszek magnetycznych i akceptorów są przypadkowe i dlatego należy przeprowadzić uśrednienie po wszystkich możliwych ich rozkładach. Należy tu podkreślić, że uśrednieniu względem rozkładów domieszek powinny podlegać *makroskopowe* wielkości wyrażone poprzez termodynamiczne i kwantowe uśrednienia (dla danego konkretnego rozkładu domieszek otrzymujemy makroskopowy wynik i dopiero on może być uśredniany po wszystkich możliwych rozkładach tych domieszek). Wkład do energii swobodnej od spinowego podukładu DMS jest zatem postaci:

$$F = -k_B T \ln \left\{ Tr \left[ \exp \left( -\frac{\hat{H}}{k_B T} \right) \right] \right\},\tag{2.5}$$

gdzie linia górna oznacza uśrednienie po przypadkowych rozkładach domieszek magnetycznych i akceptorów. Wygodnie jest wprowadzić operator:

$$\Delta \hat{H}_s = \hat{H}_s - \overline{\left\langle \hat{H}_s \right\rangle_p},\tag{2.6}$$

gdzie:

$$\overline{\left\langle \hat{H}_s \right\rangle_p} = \overline{Tr_p \left[ \hat{H}_s \exp\left( -\frac{\hat{H}_p - F_p}{k_B T} \right) \right]},\tag{2.7}$$

$$F_p = -k_B T \ln\left(Tr_p\left[\exp\left(-\frac{\hat{H}_p}{k_B T}\right)\right]\right),\tag{2.8}$$

 $Tr_p$ jest brany po stanach podukładu dziur. Dlatego $\overline{\left\langle \hat{H}_s \right\rangle_p}$ zależy tylko od spinów magnetycznych domieszek. Hamiltonian  $\hat{H}$ może być zatem wyreprezentowany w postaci

$$\hat{H} = \hat{H}_s + \hat{H}_p = \overline{\left\langle \hat{H}_s \right\rangle_p} + \hat{H}_p + \Delta \hat{H}_s.$$
(2.9)

Dla niewielkiej poprawki  $\Delta \hat{H}_s$  można zastosować perturbacyjne przedstawienie  $T \exp [15, 16]$ :

$$\exp\left(-\frac{\hat{H}}{k_BT}\right) = \exp\left(-\frac{\overline{\langle\hat{H}_s\rangle_p} + \hat{H}_p}{k_BT}\right)\hat{\sigma}\left(\beta\right),$$

$$\hat{\sigma}\left(\beta\right) = \hat{T}_{\tau}\exp\left[-\int_0^{\beta}\Delta\hat{H}_s\left(\tau\right)d\tau\right], \quad \beta = \frac{1}{k_BT},$$
(2.10)

gdzie  $\Delta \hat{H}_s(\tau)$  jest matsubarowskim obrazem (reprezentacja oddziaływania z czasem urojonym) [15]. Poprawki do energii swobodnej powodowane przez  $\Delta \hat{H}_s$ , po uśrednieniu po rozkładach, są co najmniej kwadratowego rzędu względem  $\Delta \hat{H}_s$ . Zakładamy też, że poprawki do stanu podstawowego wywołane przez strukturalne fluktuacje (czyli rozproszenia na fluktuacjach magnetycznych niejednorodnego przypadkowego rozkładu magnetycznych domieszek) są małe w porównaniu z  $E_s$ . Jeśli zachowamy tylko kwadratowe człony w równaniu (2.3), to operator  $\Delta \hat{H}_s$ jest kwadratowy w operatorach Holsteina–Primakoffa [65,66] i wkład od  $T_{\tau}$  exp do F można zaniedbać (konsystentnie z przyjętą dokładnością), jako zbyt wysokiego rzędu, gdyż po uśrednieniu liniowe człony względem  $\Delta \hat{H}_s$  znikają. Zatem,  $F = F_p + F_s$ , co oznacza, że w niskich temperaturach możliwe jest zaniedbanie rozproszeń wzbudzeń spinowych na strukturalnych fluktuacjach rozkładu gęstości domieszek magnetycznych.

#### Uśrednienie szeregu perturbacyjnego $T_{\tau} \exp$

Perturbacyjny szereg  $T_{\tau}$  exp ma postać [15, 16]:

$$\exp\left(-\frac{\hat{H}}{k_BT}\right) = \exp\left(-\frac{\overline{\left\langle \hat{H}_s \right\rangle_p} + \hat{H}_p}{k_BT}\right)\hat{\sigma}\left(\beta\right),$$

$$\hat{\sigma}\left(\beta\right) = T_{\tau} \exp\left[-\int_{0}^{\beta} \Delta \hat{H}_{s}\left(\tau\right) d\tau\right] = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^{n}}{n!} \int_{0}^{\beta} d\tau_{1} \dots \int_{0}^{\beta} d\tau_{n} T_{\tau} \left\{\Delta \hat{H}_{s}\left(\tau_{1}\right) \dots \Delta \hat{H}_{s}\left(\tau_{n}\right)\right\},$$
$$\Delta \hat{H}_{s}\left(\tau\right) = e^{\left(\frac{\overline{\langle \hat{H}_{s} \rangle_{p}} + \hat{H}_{p}}{k_{B}T}\tau\right)} \Delta \hat{H}_{s} e^{\left(-\frac{\overline{\langle \hat{H}_{s} \rangle_{p}} + \hat{H}_{p}}{k_{B}T}\tau\right)},$$

 $\beta=1/k_BT,\,T_{\tau}$ jest operatorem chronologizacji względem urojonego (matsubarowskiego) czasu $\tau.$ 

Ponieważ operatory  $\overline{\left\langle \hat{H}_s \right\rangle_p}$  i  $\hat{H}_p$  komutują i nie zależą od rozkładu domieszek magnetycznych i akceptorów, więc

$$-k_B T \ln \left\{ Tr \left[ \exp \left( -\frac{\overline{\left\langle \hat{H}_s \right\rangle_p} + \hat{H}_p}{k_B T} \right) \right] \right\} = F_p + F_s, \qquad (2.11)$$

gdzie:

$$F_s = -k_B T \ln \left\{ Tr^{(s)} \left[ \exp \left( -\frac{\overline{\left\langle \hat{H}_s \right\rangle_p}}{k_B T} \right) \right] \right\}$$
(2.12)

i

$$F = F_p + F_s - k_B T \overline{\ln [1 + \hat{\sigma}]}$$
  

$$\simeq F_p + F_s - k_B T \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m \frac{\overline{\hat{\sigma}^m}}{m!},$$
(2.13)

oraz:

$$\hat{\sigma} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta d\tau_1 \dots \int_0^\beta d\tau_n \left\langle T_\tau \left\{ \Delta \hat{H}_s(\tau_1) \dots \Delta \hat{H}_s(\tau_n) \right\} \right\rangle_0,$$
$$\langle \dots \rangle_0 = Tr \left\{ \exp\left( -\frac{\overline{\left\langle \hat{H}_s \right\rangle_p} + \hat{H}_p - F_s - F_p}{k_B T} \right) \dots \right\}.$$

W rezultacie uśrednienia po przypadkowych rozkładach domieszek magnetycznych i akceptorów (co oznaczamy linią górną) otrzymujemy:

$$\overline{\hat{\sigma}} = \sum_{n=2}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^{\beta} d\tau_1 \dots \int_0^{\beta} d\tau_n \left\langle T_\tau \left\{ \overline{\Delta \hat{H}_s(\tau_1) \dots \Delta \hat{H}_s(\tau_n)} \right\} \right\rangle_0$$

$$= \frac{1}{2} \int_0^{\beta} d\tau_1 \int_0^{\beta} d\tau_2 \left\langle T_\tau \left\{ \overline{\Delta \hat{H}_s(\tau_1) \Delta \hat{H}_s(\tau_2)} \right\} \right\rangle_0 + \dots$$
(2.14)

Zauważmy, że w wyrażeniu (2.14) suma przebiega od n = 2 zgodnie z komentarzem w poprzednim paragrafie.

#### 2.1.2. Metoda uśredniania po losowych rozkładach domieszek

Dla  $N_i \ll N$  można przyjąć losowy rozkład domieszek w krysztale i zaniedbać rozmiary komórki elementarnej, tzn. przejść do modelu ciągłego, kiedy  $V, N_i, N \to \infty$  (przy warunku  $x = \text{const}, v_0 = V/N = \text{const}$ ). Wtedy  $\int_V d^3 R_1 \dots d^3 R_{N_i} P(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_{N_i}) = 1$ , 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  $A(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_{N_i})$ jest dowolną funkcją zależną od konfiguracji domieszek, to uśrednienie po wszystkich możliwych konfiguracjach sprowadza się do:

$$\overline{A(\mathbf{R}_1,\ldots,\mathbf{R}_{N_i})} = \int\limits_V d^3 R_1 \ldots d^3 R_{N_i} A(\mathbf{R}_1,\ldots,\mathbf{R}_{N_i}) P(\mathbf{R}_1,\ldots,\mathbf{R}_{N_i}).$$
(2.15)

Dla A w postaci

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

gdzie suma przebiega po zajętych przez domieszki punktach sieciowych  $\mathbf{n}_1, \ldots, \mathbf{n}_s$ (dla konkretnej konfiguracji domieszek, np. energia potencjalna domieszek,  $U(\mathbf{R}_1, \ldots, \mathbf{R}_{N_i}) = \sum_{\mathbf{n}_1 \neq \mathbf{n}_2} u(\mathbf{R}_{\mathbf{n}_1} - \mathbf{R}_{\mathbf{n}_2}))$ , można zapisać

$$\int_{V} d^{3}R_{1} \dots d^{3}R_{N_{i}}P(\mathbf{R}_{1}, \dots, \mathbf{R}_{N_{i}}) \sum_{\mathbf{n}_{1} \neq \dots \neq \mathbf{n}_{s}} a(\mathbf{R}_{\mathbf{n}_{1}}, \dots, \mathbf{R}_{\mathbf{n}_{s}})$$

$$= \int_{V} d^{3}R_{1} \dots d^{3}R_{s}a(\mathbf{R}_{1}, \dots, \mathbf{R}_{s})$$

$$\times \overline{\sum_{\mathbf{n}_{1} \neq \dots \neq \mathbf{n}_{s}} \delta(\mathbf{R}_{1} - \mathbf{R}_{\mathbf{n}_{1}}) \dots \delta(\mathbf{R}_{s} - \mathbf{R}_{\mathbf{n}_{s}})}$$
(2.16)

$$=\left(\frac{x}{v_0}\right)^s \int\limits_V d^3R_1 \dots d^3R_s a(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_s) F_s(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_s),$$

gdzie [64]

$$F_s(\mathbf{R}_1,\ldots,\mathbf{R}_s) = \left(\frac{V}{N}\right)^s \left(\frac{N}{N_i}\right)^s \overline{\sum_{\mathbf{n}_1 \neq \ldots \neq \mathbf{n}_s} \delta(\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_{\mathbf{n}_1}) \ldots \delta(\mathbf{R}_s - \mathbf{R}_{\mathbf{n}_s})}$$

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

#### 2.1.3. Zastosowanie schematu uśrednienia do domieszek magnetycznych i akceptorów w DMS

W celu uśrednienia po losowych położeniach domieszek magnetycznych wprowadzamy funkcję rozkładu  $F_s$  ( $\mathbf{R}_1, \ldots, \mathbf{R}_s$ ), która zgodnie z przedstawionym formalizmem opisuje prawdopodobieństwo ulokowania domieszek w punktach  $\mathbf{R}_1, \ldots, \mathbf{R}_s$ :

$$F_{s}\left(\mathbf{R}_{1},\ldots,\mathbf{R}_{s}\right) = \left(\frac{V}{N}\right)^{s} \left(\frac{N}{N_{i}}\right)^{s} \overline{\sum_{\mathbf{n}_{1}\neq\ldots\neq\mathbf{n}_{s}}\delta\left(\mathbf{R}_{1}-\mathbf{R}_{\mathbf{n}_{1}}\right),\ldots,\delta\left(\mathbf{R}_{s}-\mathbf{R}_{\mathbf{n}_{s}}\right)}, \quad (2.17)$$

gdzie suma przebiega po wszystkich punktach sieciowych zajętych przez domieszki  $(\mathbf{n}_1, \ldots, \mathbf{n}_s)$ . Górna linia w równaniu (2.17) oznacza uśrednienie po wszystkich konfiguracjach przypadkowo rozlokowanych domieszek. Wszystkie węzły sieci są ekwiwalentne, zatem  $F_1(\mathbf{R}) = \frac{v_0}{x} \sum_{\mathbf{n}} \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}_{\mathbf{n}}) = 1$  i

$$\overline{\sum_{\mathbf{n}} \delta\left(\mathbf{R} - \mathbf{R}_{\mathbf{n}}\right)} = \frac{x}{v_0}.$$
(2.18)

Binarna funkcja rozkładu  $F_2(\mathbf{R}_1,\mathbf{R}_2)$ 

$$F_{2}(\mathbf{R}_{1},\mathbf{R}_{2}) = \frac{v_{0}^{2}}{x^{2}} \sum_{\mathbf{n}_{1},\mathbf{n}_{2}\neq\mathbf{n}_{1}} \delta(\mathbf{R}_{1}-\mathbf{R}_{\mathbf{n}_{1}}) \delta(\mathbf{R}_{2}-\mathbf{R}_{\mathbf{n}_{2}})$$
  
= 1 + g (**R**<sub>1</sub> - **R**<sub>2</sub>), (2.19)

(gdzie g — binarna funkcja korelacyjna) może być wykorzystana do modelowania korelacji wywołanych przez typy rozkładów za pośrednictwem odpowiedniego czynnika (formfaktora) strukturalnego, co zostanie przedstawione w dalszej części.

Dla operatorów  $\hat{B}_{\mathbf{n}}^{(+)}$  można wprowadzić ich gęstości według schematu [65],  $\sum_{\mathbf{n}} \hat{B}_{\mathbf{n}}^{(+)} = \int_{V} \hat{B}^{(+)}(\mathbf{R}) \sum_{\mathbf{n}} \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}_{\mathbf{n}}) d^{3}R.$  Z równania (2.18) wynika, że:

$$\overline{\sum_{\mathbf{n}} \hat{B}_{\mathbf{n}}^{(+)}} = \int_{V} \hat{B}^{(+)}(\mathbf{R}) \overline{\sum_{\mathbf{n}} \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}_{\mathbf{n}})} d^{3}R$$
$$= \frac{x}{v_{0}} \int_{V} \hat{B}^{(+)}(\mathbf{R}) d^{3}R.$$
(2.20)

Teraz można z kolei przeprowadzić uśrednienie po stanie podstawowym dziur (ponieważ rozważamy niskotemperaturową granicę) w celu pozbycia się dziurowofermionowych stopni swobody. Są tu dwa przypadki odnoszące się do dwóch wspomnianych poprzednio granicznych typów stanu podstawowego dziur w DMS.

1. Jeżeli potencjał akceptorowy  $V(\mathbf{r}_j)$  (*j* numeruje akceptory) jest dostatecznie głęboki, tj. mamy do czynienia ze zlokalizowanymi dziurami w T = 0, czyli z izolatorowym ich stanem podstawowym, to funkcja falowa i energia stanu podstawowego dziur (hamiltonianu  $\hat{H}_p$ ) może być przybliżona w postaci:

$$\Psi_0 \left( \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{N_p} \right) = \phi_0 \left( \mathbf{r}_1 \right) \dots \phi_0 \left( \mathbf{r}_{N_p} \right),$$
  

$$F_p \approx E_0 = N_p \varepsilon_0 - N_p \Delta,$$
(2.21)

gdzie  $\phi_0(\mathbf{r})$  i  $\varepsilon_0$  to funkcja własna i wartość własna stanu podstawowego dziury w potencjale akceptora V ( $\Delta$  jest szczeliną międzypasmową).

Założyliśmy, że średnia odległość między centrami akceptorowymi jest dużo większa od orbit zlokalizowanych dziur. Dlatego uśrednienie dowolnej funkcji zależnej od położeń dziur  $A(\mathbf{R}_1, \ldots, \mathbf{R}_{N_p})$  powinno być przeprowadzone po stanach kwantowych dziur (ich stanie podstawowym) i po losowych rozkładach akceptorów w krysztale. Takie uśrednienie dane jest formułą:

$$\overline{\langle A \rangle}_{p} = \overline{\int \Psi_{0}^{*}(\mathbf{r}) A\left(\mathbf{R}_{\mathbf{n}_{1}} + \mathbf{r}_{1}, \dots, \mathbf{R}_{\mathbf{n}_{N_{p}}} + \mathbf{r}_{N_{p}}\right) \Psi_{0}(\mathbf{r}) d^{3}\mathbf{r}} \\ \approx \overline{A\left(\mathbf{R}_{\mathbf{n}_{1}}, \dots, \mathbf{R}_{\mathbf{n}_{N_{p}}}\right)} \int |\Psi_{0}(\mathbf{r})|^{2} d^{3}\mathbf{r}, \qquad (2.22)$$

gdzie  $\mathbf{R}_{\mathbf{n}_1}, \ldots, \mathbf{R}_{\mathbf{n}_{N_p}}$  są sieciowymi położeniami centrów akceptorowych i  $\mathbf{r} = (\mathbf{r}_1, \ldots, \mathbf{r}_{N_p})$ . Należy wprowadzić (analogicznie do przypadku magnetycznych do-

mieszek) odpowiednią funkcję rozkładu:  $F_s^{(p)}(\mathbf{R}_1, \ldots, \mathbf{R}_s)$ , która określa prawdopodobieństwo rozlokowania akceptorów w punktach  $\mathbf{R}_1, \ldots, \mathbf{R}_s$ :

$$F_{s}^{(p)}\left(\mathbf{R}_{1},\ldots,\mathbf{R}_{s}\right) = \left(\frac{V}{N}\right)^{s} \left(\frac{N}{N_{p}}\right)^{s} \frac{1}{\mathbf{n}_{1}\neq\ldots\neq\mathbf{n}_{s}} \delta\left(\mathbf{R}_{1}-\mathbf{R}_{\mathbf{n}_{1}}\right),\ldots,\delta\left(\mathbf{R}_{s}-\mathbf{R}_{\mathbf{n}_{s}}\right), \quad (2.23)$$

suma przebiega po wszystkich zajętych przez akceptory węzłach sieci  $(\mathbf{n}_1, \ldots, \mathbf{n}_s)$ . Ponieważ  $F_1^{(p)}(\mathbf{R}) = \frac{v_0}{x_p} \overline{\sum_{\mathbf{n}} \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}_{\mathbf{n}})} = 1$ , zatem

$$\overline{\left\langle \sum_{j=1}^{N_p} \delta\left(\mathbf{R} - \mathbf{R}_j\right) \right\rangle_p} = \overline{\sum_{\mathbf{n}} \delta\left(\mathbf{R} - \mathbf{R}_{\mathbf{n}}\right)} = \frac{x_p}{v_0}.$$
 (2.24)

Podobnie jak w przypadku magnetycznych domieszek można i dla operatorów HP dziur wprowadzić ich gęstość  $\sum_{j=1}^{N_p} \hat{b}_j^{(+)} = \int \hat{b}^{(+)}(\mathbf{R}) \sum_{j=1}^{N_p} \delta(\mathbf{R} - \mathbf{R}_j) d^3R$ , i wtedy

$$\left\langle \sum_{j=1}^{N_p} \hat{b}_j^{(+)} \right\rangle_p = \frac{x_p}{v_0} \int \hat{b}^{(+)} \left( \mathbf{R} \right) d^3 R.$$
 (2.25)

2. Jeżeli przeciwnie do przypadku 1. centra akceptorowe są płytkie, to stan podstawowy dziur może być skolektywizowany — kwazimetaliczny, np. dla  $Ga_{1-x}Mn_xAs$  przejście izolator-metal jest oszacowane numerycznie [RPA] [79] dla  $x \sim 0.03$ . Funkcja falowa takiego kolektywnego stanu może być przybliżona przez wyznacznik Slatera  $\Phi_0$  jednocząstkowych stanów dziurowych, z czynnikiem normalizującym  $\sim \frac{1}{\sqrt{V^{N_p}N_p!}}$  (funkcje Blocha normalizowane do objętości kryształu). W tym przypadku uśrednienie powinno być przeprowadzone tylko po tym stanie  $\Phi_0$  (a nie po losowych położeniach akceptorów — w wyniku kolektywizacji dziur, rozkład centrów akceptorowych nie ma znaczenia)

$$\overline{\langle A \rangle_p} = \langle A \rangle_p = \int \Phi_0^*(\mathbf{R}) A(\mathbf{R}) \Phi_0(\mathbf{R}) d^3 \mathbf{R},$$

gdzie  $\mathbf{R} = (\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_{N_p})$ . Łatwo zauważyć, że

$$\overline{\left\langle \sum_{j=1}^{N_p} \delta\left(\mathbf{R} - \mathbf{R}_j\right) \right\rangle_p} = \frac{1}{V} \sum_{j=1}^{N_p} \int \delta\left(\mathbf{R} - \mathbf{R}_j\right) d^3 R_j = \frac{x_p}{v_0}, \quad (2.26)$$

podobnie jak w przypadku 1. — równanie (2.24), normalizacyjny czynnik w wyznaczniku Slatera daje taki sam współczynnik, jaki został otrzymany w wyniku średniowania po losowych położeniach akceptorów w przypadku 1. i dalej otrzymujemy ponownie równanie (2.25).

Dla spinowych operatorów HP można teraz użyć reprezentacji Fouriera [65]:

$$\hat{B}^{(+)}(\mathbf{R}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{v_0}{\sqrt{x}} \int \hat{B}^{(+)}(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}) \, d^3k, \qquad (2.27)$$

$$\hat{b}^{(+)}(\mathbf{R}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{v_0}{\sqrt{x_p}} \int \hat{b}^{(+)}(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{R}) d^3k.$$
(2.28)

Uwzględniając, że

$$\frac{\left\langle \sum_{\mathbf{n}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_{\mathbf{n}}} f\left(\mathbf{R}_{\mathbf{n}}\right) \right\rangle_{p}}{\left\langle \sum_{j=1}^{N_{p}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_{j}} f\left(\mathbf{R}_{j}\right) \right\rangle_{p}} = \frac{x_{p}}{v_{0}} \int e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}} f\left(\mathbf{R}\right) d^{3}R,$$

uśredniony hamiltonian,  $\overline{\langle \hat{H}_s \rangle_p}$ , uzyskuje postać (ponownie należy tu podkreślić, że jak wykazaliśmy wyżej, z dokładnością do kwadratowych członów, co jest z kolei konsystentne z zaniedbaniem rozproszeń wzbudzeń na strukturalnych fluktuacjach domieszek, uśrednienie makroskopowych wielkości — energii swobodnej — sprowadza się do uśrednienia hamiltonianu):

$$\overline{\left\langle \hat{H}_{s} \right\rangle_{p}} = N \left\{ g_{0} \mu_{B} S x B - g_{p} \mu_{B} x_{p} B / 2 + S x x_{p} \tilde{A}_{p} \left( 0 \right) \right\}$$

$$+ \frac{v_{0}}{\left(2\pi\right)^{3}} \int \hat{H}_{s} \left( \mathbf{k} \right) d^{3} k, \qquad (2.29)$$

gdzie:

$$\hat{\hat{H}}_{s}(\mathbf{k}) = \varepsilon_{s}\hat{B}^{+}(\mathbf{k})\hat{B}(\mathbf{k}) + \varepsilon_{p}\hat{b}^{+}(\mathbf{k})\hat{b}(\mathbf{k}) + \gamma(\mathbf{k})\left[\hat{b}(\mathbf{k})\hat{B}^{+}(\mathbf{k}) + \hat{b}^{+}(\mathbf{k})\hat{B}(\mathbf{k})\right], \qquad (2.30)$$

 $\mathbf{Z}$ 

$$\varepsilon_{s} = -g_{0}\mu_{B}B - x_{p}\tilde{A}_{p}(0),$$
  

$$\varepsilon_{p} = g_{p}\mu_{B}B - 2Sx\tilde{A}_{p}(0),$$
  

$$\gamma(\mathbf{k}) = -\sqrt{2Sxx_{p}}\tilde{A}_{p}(\mathbf{k}).$$

Z powyższego wynika, że typ nieporządku (wyrażający się poprzez co najmniej binarną funkcję korelacyjną) nie wpływa na  $\langle \hat{H}_s \rangle_p$ , gdzie pojawiają się tylko koncentracje x i  $x_p$ . Binarne korelacje mogą powodować niewielkie poprawki, jeśli uwzględnimy także bezpośrednie (proste) oddziaływanie wymienne domieszek magnetycznych (dużo słabsze od skośnego) — jest to przedstawione w jednym z kolejnych podrozdziałów.

#### 2.1.4. Diagonalizacja efektywnego spinowego hamiltonianu dla DMS — fale spinowe

Przeprowadzić teraz można diagonalizację (typu Bogolubova) hamiltonianu  $\hat{H}_s(\mathbf{k})$  (2.30) poprzez transformację 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 rezultacie otrzymujemy:

$$\hat{H}_{s}(\mathbf{k}) = \varepsilon_{1}(\mathbf{k})\,\hat{\alpha}_{1}^{+}(\mathbf{k})\,\hat{\alpha}_{1}(\mathbf{k}) + \varepsilon_{2}(\mathbf{k})\,\hat{\alpha}_{2}^{+}(\mathbf{k})\,\hat{\alpha}_{2}(\mathbf{k})\,, \qquad (2.31)$$

gdzie:

$$u_{\mathbf{k}}^{2} = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \sqrt{1 - \frac{4\gamma^{2} \left(\mathbf{k}\right)}{\left[\varepsilon_{1} \left(\mathbf{k}\right) - \varepsilon_{2} \left(\mathbf{k}\right)\right]^{2}}} \right\},$$

$$v_{\mathbf{k}}^{2} = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \sqrt{1 - \frac{4\gamma^{2} \left(\mathbf{k}\right)}{\left[\varepsilon_{1} \left(\mathbf{k}\right) - \varepsilon_{2} \left(\mathbf{k}\right)\right]^{2}}} \right\},$$
(2.32)

i

$$\varepsilon_{1,2} (\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \left[ (g_p - g_0) \,\mu_B B - C \right] \\
\pm \frac{1}{2} \sqrt{\left[ (g_p + g_0) \,\mu_B B - C \right]^2 + 8Sxx_p \tilde{A}_p^2 (\mathbf{k}))},$$
(2.33)

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

Ponieważ całka wymiany  $A_p(\mathbf{R})$  maleje eksponencjalnie ze wrostem odległości R [89]:

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

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

$$\tilde{A}_{p}\left(\mathbf{k}\right) = \frac{\tilde{A}_{p}(0)}{\left[1 + k^{2}l_{ex}^{2}/4\right]^{2}}, \quad \tilde{A}_{p}\left(0\right) = \frac{\pi^{2}}{4} \frac{l_{ex}^{3}}{v_{0}} A_{p}.$$
(2.34)

Przy nieobecności zewnętrznego pola magnetycznego (B = 0) i biorąc pod uwagę równanie (2.34), wyrażenie  $\varepsilon_{1,2}(\mathbf{k})$ , można przekształcić:

$$\varepsilon_{1,2} \left( \mathbf{k} \right) = -\frac{1}{2} \tilde{A}_p \left( 0 \right) \left( x_p + 2Sx \right) \left\{ 1 \pm \sqrt{1 - \frac{8Sxx_p}{\left( x_p + 2Sx \right)^2} f\left( \frac{k^2 l_{ex}^2}{4} \right)} \right\},$$

$$f\left( \frac{k^2 l_{ex}^2}{4} \right) = 1 - \frac{1}{\left[ 1 + k^2 l_{ex}^2/4 \right]^4}.$$
(2.35)

Zatem hamiltonian  $\overline{\left\langle \hat{H}_s \right\rangle_p}$ , zgodnie z równaniem (2.31), osiągnie postać:

$$\overline{\left\langle \hat{H}_{s} \right\rangle_{p}} = N \left\{ g_{0} \mu_{B} S x B - g_{p} \mu_{B} x_{p} B / 2 + 2 x x_{p} \tilde{A}_{p} \left( 0 \right) \right\}$$

$$+ \frac{v_{0}}{\left(2\pi\right)^{3}} \int \sum_{j=1}^{2} \varepsilon_{j} \left( \mathbf{k} \right) \hat{\alpha}_{j}^{+} \hat{\alpha}_{j} \left( \mathbf{k} \right) d^{3} k.$$

$$(2.36)$$

Z danych relacji wynika, że w DMS w niskich temperaturach spektrum spinowych wzbudzeń składa się z dwóch gałęzi fal spinowych. Bez zewnętrznego pola magnetycznego (B = 0) dolna gałąź  $\varepsilon_2(\mathbf{k})$  jest bezszczelinowa, tj.  $\varepsilon_2(0) = 0$ , podczas gdy górna gałąź (typu 'optycznego')  $\varepsilon_1(\mathbf{k})$  ma szczelinę (szczelina jest względnie szeroka  $\varepsilon_1(0) = -\tilde{A}_p(0)(x_p + 2Sx))$ . Materiał DMS jest zatem jako całość ekwiwalentny z ferrimagnetykiem z dwoma magnetycznymi podsieciami, i dla takiego materiału magnetycznego obecność fal spinowych ze sczeliną jest charakterystyczna (szczelina rzędu energii wymiany obu podsieci) [90]. Zauważmy, że energia gałęzi fal spinowych  $\varepsilon_2(\mathbf{k})$  rośnie z k, a gałęzi  $\varepsilon_1(\mathbf{k})$  — maleje, co przedstawiono na rys. 2.1.

Dla  $kl_{ex} \ll 1$  (blisko punku  $\Gamma$ ), dyspersja magnonów może być przybliżona w następujący sposób:

$$\begin{cases} \varepsilon_1 \left( \mathbf{k} \right) = \varepsilon_0 - Dk^2, \\ \varepsilon_2 \left( \mathbf{k} \right) = Dk^2, \end{cases}$$
(2.37)

z  $\varepsilon_0 = -\tilde{A}_p(0) (x_p + 2Sx), D = -\tilde{A}_p(0) \frac{2Sxx_p}{x_p + 2Sx} l_{ex}^2$ , podczas gdy dla granicy (sztucznej) dla  $kl_{ex} >> 1, \varepsilon_1(\infty) = -\tilde{A}_p(0) 2Sx, \varepsilon_2(\infty) = -\tilde{A}_p(0) x_p$ . Z relacji (2.36) wynika, że:

$$\left\langle \hat{\alpha}_{j}^{+}\left(\mathbf{k}\right)\hat{\alpha}_{j'}\left(\mathbf{k'}\right)\right\rangle_{s} = \frac{(2\pi)^{3}}{v_{0}}\delta\left(\mathbf{k}-\mathbf{k'}\right)\delta_{jj'}n_{j}\left(\mathbf{k}\right),\qquad(2.38)$$

gdzie:  $\langle \dots \rangle_s = Tr \left\{ \dots \exp\left(-\frac{\overline{\langle \hat{H}_s \rangle_p} - F_s}{k_B T}\right) \right\}, \ n_j (\mathbf{k}) = \left[ \exp\left(\frac{\varepsilon_j(\mathbf{k})}{k_B T}\right) - 1 \right]^{-1}.$  Dla  $\mathbf{k} \to \mathbf{k}': \frac{(2\pi)^3}{v_0} \delta\left(\mathbf{k} - \mathbf{k}'\right) \to \frac{1}{v} \int_V d^3 R = N \text{ i dlatego: } \left\langle \hat{\alpha}_j^+ \left(\mathbf{k}\right) \hat{\alpha}_j \left(\mathbf{k}\right) \right\rangle_s = Nn_j (\mathbf{k}).$ 



Rysunek 2.1. Dyspersja fal spinowych w DMS dla kilku różnych koncentracji dziur pośredniczących w wymianie spinowej; wstawka: zależność szczeliny magnonów 'optycznych' od koncetracji dziur (B) i domieszek (przy stałym  $x_p/x$ ) (A)

#### 2.1.5. Wpływ binarnych korelacji w rozkładach domieszek w DMS

Korelacje binarne w rozkładach przypadkowych domieszek magnetycznych mogą być uwzględnione za pośrednictwem funkcji  $F_2$  — równanie (2.19) i nie wpływają one na wymianę skośną domieszka–dziura, ale tylko na wymianę prostą domieszka–domieszka. Dla małej koncentracji domieszek magnetycznych i przy małym zasięgu oddziaływania wymiennego to proste wymienne sprzężenie jest dużo słabsze od skośnego pośredniczonego przez dziury. Jeśli jednak włączyć do hamiltonianu (2.2) człon z oddziaływaniem prostym

$$-\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{n},\mathbf{m}\neq\mathbf{n}} J(\mathbf{R}_{\mathbf{n}}-\mathbf{R}_{\mathbf{m}})\hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{n}}\hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{m}},$$
(2.39)

to po uśrednieniu po rozkładach domieszek (jak opisano powyżej) otrzymujemy dodatkowe człony w efektywnym hamiltonianie (w porównaniu z (2.29)):

$$\overline{\left\langle \hat{H}_{s} \right\rangle_{p}} = -N_{i}x \frac{S^{2}}{2} \tilde{J}(0) - N_{i}x \frac{S^{2}}{2} \frac{v_{0}}{(2\pi)^{3}} \int \tilde{J}(\mathbf{k})[a(\mathbf{k}) - 1] d^{3}k - N_{i}g_{0}\mu_{B}BS + N_{p}g_{p}\mu_{B}B/2 + \sqrt{N_{i}N_{p}xx_{p}}S\tilde{A}_{p}(0)$$
(2.40)

$$+\frac{v_0}{(2\pi)^3}\int \hat{H}_s(\mathbf{k})d^3k,$$

 $\mathbf{Z}$ 

$$\hat{H}_{s}(\mathbf{k}) = \epsilon_{s}(\mathbf{k})\hat{B}^{+}(\mathbf{k})\hat{B}(\mathbf{k}) + \epsilon_{p}(\mathbf{k})\hat{b}^{+}(\mathbf{k})\hat{b}(\mathbf{k}) + \gamma(\mathbf{k})\left[\hat{b}(\mathbf{k})\hat{B}^{+}(\mathbf{k}) + \hat{b}^{+}(\mathbf{k})\hat{B}(\mathbf{k})\right]$$

i

$$\epsilon_s(\mathbf{k}) = -g_0 \mu_B B - x_p \tilde{A}_p(0) + xS \left[ \tilde{J}(0) - \tilde{J}(\mathbf{k}) \right] + xS \frac{v_0}{(2\pi)^3} \int \left[ \tilde{J}(\mathbf{k}_1) - \tilde{J}(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}) \right] [a(\mathbf{k}_1) - 1] d^3k_1,$$

$$\begin{split} \epsilon_p(\mathbf{k}) &= g_p \mu_B B - x2S\tilde{A}_p(0), \, \gamma(\mathbf{k}) = -\sqrt{2Sxx_p}\tilde{A}_p(\mathbf{k}). \text{ Tylda nad } J \text{ i } A \text{ oznacza tutaj obraz Fouriera: } \tilde{A}(\mathbf{k}) \left[\tilde{J}(\mathbf{k})\right] = \frac{1}{v_0} \int A(\mathbf{k}) \left[J(\mathbf{k})\right] e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}} d^3R, \text{ i dla binarnej funkcji korelacyjnej (2.19): } g(\mathbf{r}) = 1 + \frac{v_0}{(2\pi)^3} \int \left[a(\mathbf{k}) - 1\right] e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} d^3k, \text{ i jej transformaty Fouriera } \tilde{g}(\mathbf{k}) = \frac{(2\pi)^3}{v_0} \delta(\mathbf{k}) + \left[a(\mathbf{k}) - 1\right]. \text{ Wprowadzony tu strukturalny formfaktor } a(\mathbf{k}) \text{ może być przedmiotem modelowania typu rozkładu losowego domieszek (w celu opisania realnej sytuacji eksperymentalnej odnośnie typu rozkładu domieszek: np. mogą one tworzyć podsieć) [64]. W podanym rachunku uwzględniliśmy, że \end{split}$$

$$\frac{\overline{\sum_{\mathbf{n},\mathbf{m}} J(\mathbf{R}_{\mathbf{n}} - \mathbf{R}_{\mathbf{m}})}}{\sum_{\mathbf{n},\mathbf{m}} J(\mathbf{R}_{\mathbf{n}} - \mathbf{R}_{\mathbf{m}})\hat{B}_{\mathbf{n}}^{\dagger}\hat{B}_{\mathbf{m}}} = x\left(\frac{v_{0}}{(2\pi)^{3}}\right)^{2}\int \tilde{J}(\mathbf{k}_{1})\tilde{g}(\mathbf{k}_{1})\hat{B}^{\dagger}(\mathbf{k}_{1} + \mathbf{k}_{2})\hat{B}(\mathbf{k}_{1} + \mathbf{k}_{2})d^{3}k_{1}d^{3}k_{2}.$$

Formuła (2.40) sprowadza się do (2.29), jeśli zaniedbać J.

Rola prostego oddziaływania wymiennego między domieszkami wzrasta wraz z koncentracją domieszek. Po diagonalizacji hamiltonianu (2.40) dyspersja fal spinowych ma postać (uogólnienie zależności (2.33) dla niezerowego J):

$$\epsilon_{1,2} = \frac{\epsilon_s(\mathbf{k}) + \epsilon_p(\mathbf{k})}{2} \pm \frac{1}{2}\sqrt{[\epsilon_s(\mathbf{k}) - \epsilon_p(\mathbf{k})]^2 + 4\gamma^2(\mathbf{k})}.$$
 (2.41)

Dla  $kl_{ex} \ll 1$  sprowadza się do:

$$\begin{split} \epsilon_{1} &= -\tilde{A}_{h}(0)(x_{p} + x2S) - \tilde{D}_{1}k^{2}, \quad \epsilon_{2} = \tilde{D}_{2}k^{2}, \\ \tilde{D}_{1} &= -\frac{x_{p}}{x_{p} + x2S}\tilde{D} + \frac{\gamma_{1}\sqrt{2Sxx_{p}}}{x_{p} + x2S}, \\ \tilde{D}_{2} &= -\frac{x2S}{x_{p} + x2S}\tilde{D} + \frac{\gamma_{1}\sqrt{2Sxx_{p}}}{x_{p} + x2S}, \\ \tilde{D} &= -x\frac{S}{2}\frac{d^{2}\tilde{J}}{dk^{2}}\Big|_{k=0} - \frac{4\pi}{3}xS\frac{v_{0}}{(2\pi)^{2}}\int_{0}^{\infty} [a(q) - 1]\frac{d}{dq}\left(q^{2}\frac{d\tilde{J}}{dq}\right)dq, \\ \gamma_{1} &= \sqrt{2Sxx_{p}}\frac{d^{2}\tilde{A}_{p}}{2dk^{2}}\Big|_{k=0}, \end{split}$$

gdzie  $\tilde{D}$  i  $\gamma_1$  są dodatnie oraz dla J = 0,  $\tilde{D}$  znika. Można zatem stwierdzić, że binarne korelacje rozkładów domieszek magnetycznych (wchodzące poprzez formfaktor  $a(\mathbf{k})$ ) nie odgrywają roli, dopóki nie włączamy (zwykle słabego) wymiennego oddziaływania prostego.

Ten wynik potwierdza numeryczne analizy w ramach symulacji Monte-Carlo [80], które również pokazują słabą zależność magnetycznych własności DMS od losowego rozkładu domieszek i od modelu całki wymiany i jej zasięgu [80, 85], szczególnie w niskich temperaturach.

#### 2.1.6. Niskotemperaturowe zachowanie DMS — wpływ fal spinowych

W celu opisania niskotemperaturowej magnetyzacji DMS można użyć relacji (2.31)–(2.33) i (2.38). Gęstość magnetyzacji DMS, składająca się z magnetyzacji dziur i magnetycznych domieszek, wynosi:

$$M_{z}(T) = \frac{N}{V} \mu_{B} \left( g_{0} Sx - \frac{1}{2} g_{p} x_{p} \right) + \frac{1}{V} \frac{v_{0}}{(2\pi)^{3}} \int \left\{ -g_{0} \mu_{B} \left\langle \hat{B}^{+} \left( \mathbf{k} \right) \hat{B} \left( \mathbf{k} \right) \right\rangle_{s} + g_{p} \mu_{B} \left\langle \hat{b}^{+} \left( \mathbf{k} \right) \hat{b} \left( \mathbf{k} \right) \right\rangle_{s} \right\} = \frac{\mu_{B}}{v_{0}} \left\{ (g_{0} Sx - g_{p} x_{p}/2) + \frac{\pi}{2} \int_{0}^{1} z^{2} \left[ Kn_{1} + Rn_{2} \right] dz \right\} d^{3}k,$$
(2.42)

gdzie:  $K = -g_0 v_z^2 + g_p u_z^2$ ,  $R = -g_0 u_z^2 + g_p v_z^2$ ,  $z = k/k_{\text{max}} = ka/\pi$  (wektor falowy nie może być dłuższy od  $k_{\text{max}} = \pi/a$ );  $\varepsilon_1(z) = \varepsilon_0 - D^* z^2$ ,  $\varepsilon_2(z) = D^* z^2$ , gdzie:



Rysunek 2.2. Niskotemperaturowa poprawka do magnetyzacji DMS (~ $T^{3/2}$ ) od fal spinowych w DMS dla kilku różnych koncentracji i współczynników giromagnetycznych: A ( $x = 0,1, x_p = 0,5, g_0 = 2, g_p = 1,6$ ), B ( $x = 0,1, x_p = 0,1, g_0 = 2, g_p = 1,6$ ), C ( $x = 0,1, x_p = 0,02, g_0 = 2, g_p = 2$ ), D ( $x = 0,1, x_p = 0,01, g_0 = 2, g_p = 1$ )

 $D^*=D/a^2,$ i $u_z^2\approx u_0^2=x_p/(x_p+2Sx),~v_z^2\approx v_0^2=2Sx/(x_p+2Sx);~n_{1,2}$ jest rozkładem Bosego–Einsteina dla fal spinowych. W przypadku  $T\rightarrow 0,$ 

$$\int_{0}^{1} z^{2} n_{1} dz << \int_{0}^{1} z^{2} n_{2} dz \approx 2,612 \left(\frac{k_{B}T}{D^{*}}\right)^{3/2},$$

tylko dolna gałąź fal spinowych daje wkład do magnetyzacji i dla niskich temperatur otrzymujemy wyrażenie dla  $M_z(T)$ :

$$M_z(T) \approx \frac{\mu_B}{v_0} \left\{ g_p Sx \left( \frac{g_0}{g_p} - \frac{x_p}{2Sx} \right) +4.1 \frac{g_0 2Sx}{x_p + 2Sx} \left( \frac{g_p}{g_0} - \frac{x_p}{2Sx} \right) \left( \frac{k_B T}{D^*} \right)^{3/2} \right\}.$$

$$(2.43)$$

Z wyrażenia tego wynika, że  $M_z(T)$  dla małych T zależy istotnie od stosunku koncentracji  $x_p/x$  i stosunku czynników giromagnetycznych  $g_0/g_p$ . Dla domieszek Mn można przyjąć  $g_0 = 2$ , a dla dziur  $g_p = 2$  dla j = 1/2 i  $g_p = 4/3$  dla j = 3/2 (efektywny czynnik  $g_p$  dla Ga(Mn)As oszacowany na podstawie magnetyzacji w modelu 6-pasmowym Kohna–Luttingera względem koncentracji x i  $x_p$  zmienia się w granicach 1,45–1,6) [76].

Rozpatrujemy tu przypadek kiedy całkowity moment magnetyczny domieszek jest większy od całkowitego momentu magnetycznego dziur, tj.  $\frac{g_0}{g_p} > \frac{x_p}{2Sx}$ , dlatego pierwszy człon w równaniu (2.43) jest zawsze dodatni. Ale przy dostatecznie

wysokiej koncentracji dziur  $x_p$ ,  $\frac{x_p}{2Sx} > \frac{g_p}{g_0}$ , i drugi człon w równaniu (2.43) staje się ujemny, czyli moment magnetyczny DMS maleje ze wzrostem temperatury, proporcjonalnie do  $T^{3/2}$  (w niskich temperaturach). Dla niskiej i średniej koncentracji dziur, kiedy  $\frac{x_p}{2Sx} < \frac{g_p}{g_0}$ , moment magnetyczny DMS rośnie wraz ze wzrostem temperatury ~  $T^{3/2}$  (rys. 2.2). To nietypowe zachowanie spontanicznego namagnesowania DMS w niskich temperaturach i małych koncentracjach dziur może być wyjaśnione dzięki spostrzeżeniu, że ze wzrostem temperatury ustawienie spinu dziur łatwiej się zmienia niż ustawienie spinu domieszek magnetycznych. Wraz z dalszym wzrostem temperatury  $M_s(T)$  osiąga maksimum, a następnie maleje do zera w temperaturze krytycznej [54,55,60]. Zauważmy też, że jeśli  $g_0/g_p = 1$ , to moment magnetyczny DMS zawsze wzrasta z temperaturą dla  $x_p < x$  (w pobliżu T = 0). Znak czynnika ~  $T^{3/2}$  zależy zatem od stosunku  $\frac{x_p}{x}$  (może mieć to związek z obserwowanym eksperymentalnie wypukło-wklęsłym przejściem dla magnetyzacji DMS zachowującej się odmiennie od typowego przebiegu typu Curie w średnich temperaturach w zależności od koncentracji dziur i domieszek [55,56]).

Uśredniona energia spinowego podukładu DMS, zgodnie z równaniem (2.36), bez obecności zewnętrznego pola magnetycznego, wynosi:

$$E_{s}(T) = \left\langle \overline{\left\langle \hat{H}_{s} \right\rangle_{p}} \right\rangle_{s}$$

$$= N \left\{ 2xx_{p}\tilde{A}_{p}(0) + \frac{\pi}{2} \int_{0}^{1} z^{2} \sum_{j=1}^{2} \varepsilon_{j}(z) n_{j}(z) dz \right\}.$$
(2.44)

W niskich temperaturach

$$\int_{0}^{1} z^{2} \varepsilon_{1} n_{1} dz \ll \int_{0}^{1} z^{2} \varepsilon_{2} n_{2} dz \approx 0.891 D^{*} \left(\frac{k_{B}T}{D^{*}}\right)^{5/2},$$

skąd wynika, że fale spinowe ze szczeliną praktycznie nie dają tu wkładu do całkowitej energii, zatem  $E_s(T)$  przyjmuje dla małych T postać:

$$E_{s}(T) = N\left[2xx_{p}\tilde{A}_{p}(0) + \frac{\pi}{2}0,891D^{*}\left(\frac{k_{B}T}{D^{*}}\right)^{5/2}\right],$$
(2.45)

oraz wkład do ciepła właściwego DMS związany z magnonami (falami spinowymi) jest w niskich temperaturach dany zależnością:  $\Delta C_s = \frac{1}{V} \frac{\partial E_s}{\partial T} = a_{mag} T^{3/2}$ , gdzie:  $a_{mag} = \frac{3.5}{v_0} k_B \left(\frac{k_B}{D^*}\right)^{3/2}$ . Wkład do ciepła właściwego DMS od magnonów rośnie wraz ze wzrostem temperatury zgodnie z typową dla ferromagnetyków potęgową zależnością z wykładnikiem 3/2. Ponieważ pojemność cieplna gazu fononów jest proporcjonalna do  $T^3$ , zatem  $C_V = a_{ph}T^3 + a_{mag}T^{3/2}$  lub  $T^{-3/2}C_V = a_{ph}T^{3/2} + a_{mag}$ , co pozwala na określenie  $D^*$  na podstawie pomiarów ciepła właściwego DMS.

## 2.2. Dekoherencja spinu ekscytonu w kropce kwantowej otoczonej materiałem DMS

# 2.2.1. Temperaturowa zależność energetycznego przesunięcia ekscytonu zlokalizowanego w kropce kwantowej zanurzonej w materiale DMS

Część magnetyzacji DMS pochodzaca od fal spinowych (i zależna od temperatury) pozwala na oszacowanie zależności temperaturowej przesunięcia energetycznego stanu podstawowego ekscytonu w kropce kwantowej zanurzonej w materiale DMS. Spinowa struktura ekscytonu w kropce odpowiada czterem możliwym wzajemnym ustawieniom spinów pary elektronu i dziury tworzących ekscyton. Bez zewnętrznego pola magnetycznego i w fazie paramagnetycznej otaczającego te kropke materiału DMS, te cztery stany spinowe sa zdegenerowane. W fazie uporzadkowanej magnetycznie DMS następuje rozszczepienie tych stanów przez wewnetrzne pole Weissa (magnetyzacje spontaniczna układu domieszek magnetycznych; tylko ta część magnetyzacji DMS wpływa na spiny ekscytonu w kropce i tylko spiny domieszek wymiennie oddziałują ze spinami pary e-h w kropce). Temperaturowy dodatek do tej magnetyzacji układu domieszek magnetycznych prowadzi do zależnej od temperatury wielkości energetycznej rozszczepienia poziomów, w szczególności do przesunięcia najniższego z nich czyli stanu podstawowego. W eksperymencie [86,87] obserwuje się wzrost energii tego stanu wraz ze wzrostem temperatury (blue-shift), który wyjaśnimy w ramach naszego modelu.

Hamiltonian opisujący oddziaływanie pary e-h (ekscytonu) w kropce kwantowej z otoczeniem DMS ma postać (spiny pasmowych dziur nie wnoszą wkładu):

$$\hat{H}_{sd}(\mathbf{R}_{e}, \mathbf{R}_{h}) = -2\beta_{0} \sum_{\mathbf{n}} A_{e}(\mathbf{R}_{e} - \mathbf{R}_{n}) \hat{\mathbf{s}}_{e} \hat{\mathbf{S}}_{n}$$

$$-2\beta_{0} \sum_{\mathbf{n}} A_{h}(\mathbf{R}_{h} - \mathbf{R}_{n}) \hat{\mathbf{s}}_{h} \hat{\mathbf{S}}_{n},$$

$$(2.46)$$

gdzie:  $\hat{\mathbf{s}}_{e(h)}$  jest operatorem spinu elektronu (dziury) ekscytonu zlokalizowanego w kropce kwantowej,  $\mathbf{R_n}$  — położenie domieszki magnetycznej ( $\mathrm{Mn^{2+}}$ ) w DMS,  $\hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{n}}$  jest operatorem spinu tej domieszki; sumowanie po  $\mathbf{n}$  przebiega po wszystkich zajętych przez domieszki węzłach sieci krystalicznej. Czynnik  $A_{e(h)}(\mathbf{R}_{e(h)} - \mathbf{R_n})$  opisuje oddziaływanie wymienne *s-d* pomiędzy elektronem (dziurą) ekscytonu

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 $\beta_0$	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

Tabela 2.1. Parametry struktury dla Zn<sub>0.75</sub>Mn<sub>0.25</sub>Se/CdSe [86–88]

w kropce a magnetyczną domieszką (fenomenologiczny czynnik  $\beta_0$  uwzględniający dodatkowe osłabienie tej całki wymiany spowodowane przez strukturalną separację kropki kwantowej zanurzonej w krysztale DMS dopasowujemy do danych eksperymentalnych [86, 87]).

Przesunięcie energii ekscytonu (dla zgodnego (1) i przeciwstawnego (2) ustawienia spinów pary e-h) ma postać:

$$E_{1(2)ns_z} = E_n + \Delta + 2s_z S x_i \beta \left[ \tilde{A}_e(0) - (+) \tilde{A}_h(0) \right] m(T), \qquad (2.47)$$

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 przeciwstawnego ustawienia  $[(1, s_z = \pm \frac{1}{2})]$  lub zgodnego  $[(2, s_z = \pm \frac{1}{2})]$  spinów e-h, S — 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. 2.1 (i dla stanu podstawowego pary e-h, tj. stanu  $[1, s_z = \frac{1}{2}]$ ) można oszacować [62] odpowiedni temperaturowy wkład do magnetyzacji domieszek:  $m(T) \sim 5,6 \cdot 10^{-3}T^{3/2}$ . Obliczone zgodnie z podanymi formułami przesunięcie energetyczne tego poziomu można porównać (poprzez zależność (2.47) i dla  $\beta_0 \sim 0,1$  [86,87]) z danymi pomiarowymi dla układu typu kropka zanurzona w DMS: Zn<sub>0,75</sub>Mn<sub>0,25</sub>Se/CdSe [86,87] (tab. 2.2). Porównanie obliczonego przesunięcia z danymi eksperymentalnymi podane w tab. 2.2 (dla materiału opisanego w Tab. 2.1) wydaje się wskazywać na słuszność przedstawionego opisu teoretycznego.

#### 2.2.2. Defazowanie spinu ekscytonu w kropce kwantowej przez fale spinowe w otaczającym kropkę DMS

W analogii do defazowania orbitalnych (ładunkowych) stopni swobody nośników uwięzionych w kropkach kwantowych przez ubieranie w fonony (hybry-

T[K]	eksperyment $[87]$ $[eV]$	$model \ [eV]$
2	2,085	2,085
9	2,088	2,087
20	2,090	2,091

Tabela 2.2.  $\Delta E$  dla EMP w kropce kwantowej w DMS: Zn<sub>0,75</sub>Mn<sub>0,25</sub>Se/CdSe

dyzacje stanów zlokalizowanych z kolektywnymi), można także oczekiwać podobnego zjawiska w odniesieniu do spinów nośników w kropkach (elektronów, dziur lub ekscytonów) w wyniku ich hybrydyzacji z magnonami (falami spinowymi) z otaczającego kropkę kryształu półprzewodnika półmagnetycznego (DMS), znajdującego się w uporządkowanej magnetycznie fazie (wtedy obecne są w nim fale spinowe). Ubieranie spinowej struktury zlokalizowanego ekscytonu w fale spinowe odpowiada tworzeniu ekscytonowego magnetopolaronu (EMP) (dalsze uogólnienie fononowego polaronu).

Defazowanie stanu ekscytonu w wyniku tworzenia magnetopolaronu EMP w kropce wiaże sie z inercja podukładu magnetycznego w DMS. W przypadku szybko (nieadiabatycznie) wzbudzonego w kropce ekscytonu następuje z opóźnieniem hybrydyzacja jego spinu z modami fal spinowych. Goły ekscyton nie jest stanem stacjonarnym przy uwzglednieniu oddziałującego z jego spinem magnetycznego podukładu DMS. Formowanie EMP, czyli stopniowe ubieranie spinowej struktury ekscytonu w chmure fal spinowych zlokalizowanych w kropce towarzyszy transfer nadmiarowej spinowej energii wymiennej do reszty kryształu (na zewnatrz kropki) przez opuszczający kropke pakiet falowy magnonów (energia EMP jest mniejsza od energii gołego ekscytonu i dlatego EMP jest stabilna kwaziczastka). W tym stanie niestacjonarnym energia jest nieokreślona, choć w średnim dzielona pomiędzy oddziałującymi układami: ekscytonu w kropce i magnonami w DMS (i podobnie jak w przypadku tworzenia polaronów fononowych nie może być interpretowana w terminach przejść kwantowych opisanych złotą regulą Fermiego, ale jako ewolucja niestacjonarnego stanu dwóch układów splątanych kwantowo w nieseparowalny sposób).

W celu oszacowania czasu defazowania spinu ekscytonu w wyniku formowania z chmurą magnonów magnetopolaronu EMP można, korzystając z analogii do podobnych efektów fononowych, posłużyć się formułą

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

gdzie  $v_g$  oznacza prędkość grupową pakietu magnonów unoszących nadmiarową energię wymienną na zewnątrz obszaru kropki o rozmiarach d.

Ta prędkość grupowa  $v_g = \frac{\partial \omega(k)}{\partial k}$  jest ustalana dla  $k \simeq 1/d$ , podobnie jak w przypadku fononów z powodu efektu szyjki butelki dla kropek kwantowych. Ubieranie spinu ekscytonu w fale spinowe z DMS jest podobne do tworzenia polaronu z fononami LO, ponieważ magnony podobnie do fonów LO mają dyspersję kwadratową. Posługując się wyprowadzonymi analitycznymi formułami na dyspersję magnonów w DMS, możemy oszacować czas defazowania w następujący sposób:

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

ponieważ  $k\simeq 1/d$  (zgodnie z efektem szyjki butelki [34, 35]). Czas ubierania w magnony (defazowania spinu w kropce) skaluje się jak  $d^2$ i jest względnie długi dla typowych nanostruktur. Czas defazowania zależy od koncentracji domieszek magnetycznych i od koncentracji dziur w DMS za pośrednictwem D— równanie (2.37). Przykłady przedstawiono na rys. 2.3. Dla kropki w DMS typu Zn(Mn)Se/CdSe o rozmiarach  $\sim 10$  nm i dla koncentracji domieszek magnetycznych x=0,25i dziur  $x_p=0,025$ czas defazowania spinu obliczony według podanej formuły osiąga eksperymetalnie zmierzoną wartość dla tego układu (Zn\_{0,75}Mn\_{0,25}Se/CdSe) [86–88], około 150 ps. Czas anihilacji ekscytonu w tym układzie jest rzędu 600 ps, co pozwala na kompletne uformowanie magnetopolaronu EMP w kropce.

Defazowanie spinu w kropce kwantowej w wyniku ubierania go w chmure fal spinowych z magnetycznego otoczenia ma istotne znaczenie do oceny realności możliwych schematów koherentego sterowania spinem w kropkach i wykorzystania spinu dla przetwarzania informacji kwantowej w nanostrukturach magnetycznych. Magnetyczne nanostruktury (z wykorzystaniem np. DMS) wydają się bardzo atrakcyjne w zastosowaniach informatycznych z uwagi na silne przyspieszenie sterowania spinem (tj. magnetycznie wywoływanych oscylacji Rabiego qubitu spinowego) [7,8], z powodu gigantycznego wzrostu członu Pauliego (wzrostu efektywnego czynnika giromagnetycznego). Jak wynika z przedstawionej analizy w magnetycznych układach pojawiają się jednak niedostrzegane poprzednio silne efekty dekoherencyjne związane z obecnością fal spinowych w uporządkowanych magnetycznie fazach. Defazowanie spinu w wyniku inercyjnego tworzenia magnetopolaronów jest równie niekorzystne jak tworzenie zwykłych polaronów w odniesieniu do ładunków w nanostrukturach. Czas defazowania spinów w kropkach w otoczeniu DMS lokuje się pośrodku okna sześciu rzędów między czasami sterowania spinem (pikosekundy) a czasem amplitudowej dekoherencji spinu w kropce (mikrosekundy), wymaganych przez kryteria DiVincenzo [7,8,22] (dla implementacji kwantowej korekty błędów). Cała skala czasowa kinetyki spinowej w kropkach jest przesunięta w stosunku do kinetyki ładunków o 3 rzędy wielkości



Rysunek 2.3. Zależność czasu defazowania spinu ekscytonu w kropce kwantowej w otoczeniu półmagnetycznego półprzewodnika (DMS) od rozmiaru kropki (paraboliczna), dla różnych koncentracji domieszek i dziur

w kierunku wolniejszych procesów, i defazowanie również, lokując się niekorzystnie w środku między sterowaniem a relaksacją.

## 2.3. Mikroskopowy opis defazowania spinu w kropce kwantowej w magnetycznym otoczeniu

Przedmiotem rozważań jest półprzewodnik półmagnetyczny (DMS) typu III–V (np. Ga(Mn)As) lub II–VI (np. Zn(Mn)Se). Dodatkowo zakładamy, że w materiale DMS ulokowana jest kropka kwantowa (np. Ga(Mn)As/InAs lub Zn(Mn)Se/CdSe [86–88]). W kropce rozpatrujemy szybko (nieadiabatycznie) wzbudzony ekscyton. Hamiltonian całego takiego układu ma postać:

$$\hat{H} = \hat{H}_{ex} + \hat{H}_{sd} + \hat{H}_{pd},$$
 (2.48)

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

$$\hat{H}_{ex} = \hat{H}_{e}(\mathbf{R}_{e}) + \hat{H}_{h}(\mathbf{R}_{h}) - \frac{e^{2}}{\epsilon_{0}|\mathbf{R}_{e} - \mathbf{R}_{h}|} + \Delta + g_{e}\mu_{B}B\hat{s}_{ze} + g_{h}\mu_{B}B\hat{s}_{zh}, \quad (2.49)$$

i jednocząstkowy hamiltonian elektronu (dziury) w kropce

$$\hat{H}_{e(h)} = -\frac{\hbar^2}{2m_{e(h)}^*} \left[ \Delta_r + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] + \frac{1}{2} m_{e,h}^* (\omega_{0,e(h)}^2 + \frac{1}{4} \omega_{c,e(h)}^2) r^2 + \frac{\hbar \omega_{c,e(h)}}{2} \hat{l}_z + U_{e(h)}(z),$$
(2.50)

gdzie  $\mathbf{R} = (\mathbf{r}, z), \ \mathbf{r} = (x, y); \ \omega_{0,e(h)}$  — 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;  $\Delta$  — wzbroniona przerwa (e-h);  $\mu_B = \frac{\hbar|e|}{2m_ec}$  — 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 ma postać [86, 87, 90]

$$\hat{H}_{sd}(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h) = -2\beta_0 \sum_{\mathbf{n}} A_e(\mathbf{R}_e - \mathbf{R}_{\mathbf{n}}) \hat{\mathbf{s}}_e \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{n}} - 2\beta_0 \sum_{\mathbf{n}} A_h(\mathbf{R}_e - \mathbf{R}_{\mathbf{n}}) \hat{\mathbf{s}}_h \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{n}},$$
(2.51)

gdzie:  $\mathbf{R}_{e(h)}$  — położenie elektronu (dziury) w kropce;  $\hat{\mathbf{s}}_{e(h)}$  — operator spinu elektronu (dziury) w kropce;  $\mathbf{R}_{\mathbf{n}}$  — położenie magnetycznej domieszki w węźle **n** sieci DMS (dla uproszczenia nie uwzględniamy międzywęzłowych położeń domieszek);  $\hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{n}}$  — operator spinu magnetycznej domieszki w punkcie  $\mathbf{R}_{\mathbf{n}}$ ; sumowanie po **n** przebiega po wszystkich węzłach zajętych przez domieszki;  $\beta_0$  — fenomenologiczny parametr redukujący oddziaływanie wymienne z kropką w wyniku strukturalnej separacji (dopasowywany z eksperymentu,  $\beta_0 \sim 0.1$  [86–88]). Czynnik  $A_{e(h)}(\mathbf{R}_e - \mathbf{R}_{\mathbf{n}})$  opisuje s(p)-d oddziaływanie wymienne elektronu (dziury) z domieszką ( $A_e(\mathbf{R}_e - \mathbf{R}_{\mathbf{n}}) > 0$  i  $A_h(\mathbf{R}_e - \mathbf{R}_{\mathbf{n}}) < 0$ ).

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

$$\hat{H}_{pd} = \hat{H}_p + g_p \mu_B B \sum_{j=1}^{N_p} \hat{\mathbf{s}}_z + g_0 \mu_B B \sum_{\mathbf{n}} \hat{S}_{z\mathbf{n}} - 2 \sum_{\mathbf{n}} \sum_{j=1}^{N_p} A_p (\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_n) \hat{\mathbf{s}}_j \hat{\mathbf{S}}_n,$$
(2.52)

gdzie:  $\mathbf{R}_j$ ,  $\hat{\mathbf{s}}_j$  są położeniem i spinem *j*-tej dziury,  $g_0, g_p$  — czynnik giromagnetyczny (Landego) domieszki magnetycznej i dziury pasmowej.

Fermionowy hamiltonian dziur pasmowych —  $\hat{H}_p$  — może być modelowany dla płytkich i głębokich akceptorów w sposób przedstawiony w poprzednim rozdziale. W obu przypadkach  $\hat{H}_p$  nie zależy jawnie od konkretnego rozkładu akceptorów w krysztale, co ułatwia uśrednienie po stanach dziurowych i rozkładach domieszek (według schematu przedstawionego w poprzednim podrozdziale).

Dla spinowej struktury ekscytonu w kropce przyjmujemy reprezentację czterech spinowych stanów pary  $e-h s_{ze} = \pm \frac{1}{2}$  i  $s_{zh} = \pm \frac{1}{2}$ , zdegenerowanych przy nieobecności pola magnetycznego i dla paramagnetycznej fazy DMS. Zatem ekscytonowe funkcje własne i energie (odpowiadające hamiltonianowi  $H_{ex}$ ) mają postać: — dla przeciwnych spinów w parze e-h (j = 1)

$$\Psi_{n,s_z}^1(\mathbf{R}_e\sigma_e,\mathbf{R}_h\sigma_h) = \psi_n^1(\mathbf{R}_e,\mathbf{R}_h\sigma_h)\phi_{s_z}(\sigma_e)\phi_{-s_z}(\sigma_h), \qquad (2.53)$$

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

$$\Psi_{n,s_z}^2(\mathbf{R}_e\sigma_e,\mathbf{R}_h\sigma_h) = \psi_n^1(\mathbf{R}_e,\mathbf{R}_h\sigma_h)\phi_{s_z}(\sigma_e)\phi_{s_z}(\sigma_h).$$
 (2.54)

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,

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

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 bozonowe operatory anihilacji
(kreacji) ekscytonu w stanie  $jns_z$  (j = 1, 2 dla przeciwnego i zgodnego ustawienia spinów w parze e-h). Hamiltonian (2.49) można zatem przedstawić w postaci:

$$\hat{H}_{ex} = \sum_{jns_z} E_{jns_z} \hat{a}_{jns_z}^{\dagger} \hat{a}_{jns_z}.$$
(2.55)

Hamiltonian (2.51) także może być przepisany (w bazie stanów ekscytonowych (2.55)), tj.  $\sum_{\mu,\mu'} < \mu |\hat{H}_{sd}|\mu' > \hat{a}^{+}_{\mu}\hat{a}_{\mu'}$ , gdzie  $\mu = (jns_z)$ .

# 2.3.1. Oddziaływanie wymienne domieszki w DMS z ekscytonem w kropce

Hamiltonian spinowej wymiany między ekscytonem w kropce i magnetyczną domieszką w DMS ma postać (2.51), tj.  $\hat{H}_{sd}(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h) = -2\beta_0 \sum_{\mathbf{n}} A_e(\mathbf{R}_e - \mathbf{R}_{\mathbf{n}})\hat{\mathbf{s}}_e \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{n}} - 2\beta_0 \sum_{\mathbf{n}} A_h(\mathbf{R}_e - \mathbf{R}_{\mathbf{n}})\hat{\mathbf{s}}_h \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{n}}$ . Uwzględniając, że jego część odpowiadającą układowi  $e^{-h}$  ma jednocząstkową postać, można zastosować reprezentację  $\hat{H}_{sd} = \sum_{\mu,\mu'} \langle \mu | \hat{H}_{sd} | \mu' \rangle \hat{a}_{\mu}^{+} \hat{a}_{\mu'},$ z $\mu = (jns_z)$ , która prowadzi do wyrażenia:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{sd} &= -2\beta_0 \sum_{\mathbf{m}ns_z, n's'_z} \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{m}} \left[ \hat{a}^+_{1ns_z} \hat{a}_{1n's'_z} \left\{ < n|A_e|n' > \sum_{\sigma_e} \phi^*_{s_z}(\sigma_e) \hat{\mathbf{s}}_e \phi_{s'_z}(\sigma_e) \right. \\ &+ < n|A_h|n' > \sum_{\sigma_h} \phi^*_{-s_z}(\sigma_h) \hat{\mathbf{s}}_h \phi_{-s'_z}(\sigma_h) \right\} \\ &+ \hat{a}^+_{2ns_z} \hat{a}_{2n's'_z} \left\{ < n|A_e|n' > \sum_{\sigma_e} \phi^*_{s_z}(\sigma_e) \hat{\mathbf{s}}_e \phi_{s'_z}(\sigma_e) \right. \\ &+ < n|A_h|n' > \sum_{\sigma_h} \phi^*_{s_z}(\sigma_h) \hat{\mathbf{s}}_h \phi_{s'_z}(\sigma_h) \right\} \\ &+ \hat{a}^+_{1ns_z} \hat{a}_{2n's'_z} \left\{ < n|A_e|n' > \sum_{\sigma_e} \phi^*_{s_z}(\sigma_e) \hat{\mathbf{s}}_e \phi_{s'_z}(\sigma_e) \right. \\ &+ < n|A_h|n' > \sum_{\sigma_h} \phi^*_{s_z}(\sigma_h) \hat{\mathbf{s}}_h \phi_{-s'_z}(\sigma_h) \right\} \\ &+ \hat{a}^+_{2ns_z} \hat{a}_{1n's'_z} \left\{ < n|A_e|n' > \sum_{\sigma_e} \phi^*_{s_z}(\sigma_e) \hat{\mathbf{s}}_e \phi_{s'_z}(\sigma_e) \\ &+ < n|A_h|n' > \sum_{\sigma_h} \phi^*_{s_z}(\sigma_h) \hat{\mathbf{s}}_h \phi_{-s'_z}(\sigma_h) \right\} \\ &+ < n|A_h|n' > \sum_{\sigma_h} \phi^*_{-s_z}(\sigma_h) \hat{\mathbf{s}}_h \phi_{s'_z}(\sigma_h) \right\} \right], \end{aligned}$$

gdzie:

$$< n|A_{e(h)}|n'> = \int \psi_n^*(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h) A_{e(h)}(\mathbf{R}_{e,(h)} - \mathbf{R}_m) \psi_{n'}(\mathbf{R}_e, \mathbf{R}_h) d^3 \mathbf{R}_e d^3 \mathbf{R}_h.$$

Następnie użyjemy transformacji Fouriera,  $f(\mathbf{R}) = \frac{v_0}{(2\pi)^3} \int d^3k \tilde{f}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}}$ , gdzie  $v_0 = \frac{V}{N}$  jest objętością komórki elementarnej w krysztale, tj.

$$< n|A_{e,h}(\mathbf{R}_{e,h} - \mathbf{R}_{\mathbf{m}})|n'> = \frac{v_0}{(2\pi)^3} \int d^3k F_{nn'}^{(e,h)}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{\mathbf{m}}}.$$

Ponieważ dla s = 1/2 mamy  $\phi_{1/2} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$  i  $\phi_{-1/2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ , zatem niezerowe sumy to:

$$\sum_{\sigma} \phi_{1/2}^{*}(\sigma) \hat{s}_{x} \phi_{-1/2}(\sigma) = 1/2, \quad \sum_{\sigma} \phi_{-1/2}^{*}(\sigma) \hat{s}_{x} \phi_{1/2}(\sigma) = 1/2,$$

$$\sum_{\sigma} \phi_{1/2}^{*}(\sigma) \hat{s}_{y} \phi_{-1/2}(\sigma) = -i/2, \quad \sum_{\sigma} \phi_{-1/2}^{*}(\sigma) \hat{s}_{y} \phi_{1/2}(\sigma) = i/2,$$

$$\sum_{\sigma} \phi_{1/2}^{*}(\sigma) \hat{s}_{z} \phi_{1/2}(\sigma) = 1/2, \quad \sum_{\sigma} \phi_{-1/2}^{*}(\sigma) \hat{s}_{z} \phi_{-1/2}(\sigma) = -1/2,$$
(2.57)

dla macierzy Pauliego:  $\hat{s}_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \hat{s}_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \hat{s}_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$ Zatem,

$$\hat{H}_{sd} = -\frac{v_0\beta_0}{(2\pi)^3} \int d^3k \sum_{nn',\mathbf{m}} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_{\mathbf{m}}} \left\{ 2\hat{S}_{z\mathbf{m}} \right. \\ \left. \left[ \left( F_{nn'}^e(\mathbf{k}) - F_{nn'}^h(\mathbf{k}) \right) \sum_{s_z = -1/2}^{1/2} s_z \hat{a}_{1ns_z}^+ \hat{a}_{1n's_z} \right. \\ \left. + \left( F_{nn'}^e(\mathbf{k}) + F_{nn'}^h(\mathbf{k}) \right) \sum_{s_z = -1/2}^{1/2} s_z \hat{a}_{2ns_z}^+ \hat{a}_{2n's_z} \right. \\ \left. + F_{nn'}^e(\mathbf{k}) \sum_{s_z = -1/2}^{1/2} s_z \hat{a}_{1ns_z}^+ \hat{a}_{2n's_z} \right. \\ \left. + F_{nn'}^h(\mathbf{k}) \sum_{s_z = -1/2}^{1/2} s_z \hat{a}_{1ns_z}^+ \hat{a}_{2n'-s_z} \right. \\ \left. + F_{nn'}^e(\mathbf{k}) \sum_{s_z = -1/2}^{1/2} s_z \hat{a}_{2ns_z}^+ \hat{a}_{1n's_z} \right.$$

$$\left. + F_{nn'}^e(\mathbf{k}) \sum_{s_z = -1/2}^{1/2} s_z \hat{a}_{2ns_z}^+ \hat{a}_{1n's_z} \right.$$

$$\left. + F_{nn'}^e(\mathbf{k}) \sum_{s_z = -1/2}^{1/2} s_z \hat{a}_{2ns_z}^+ \hat{a}_{1n's_z} \right.$$

$$\left. + F_{nn'}^e(\mathbf{k}) \sum_{s_z = -1/2}^{1/2} s_z \hat{a}_{2ns_z}^+ \hat{a}_{1n's_z} \right.$$

$$\left. + F_{nn'}^e(\mathbf{k}) \sum_{s_z = -1/2}^{1/2} s_z \hat{a}_{2ns_z}^+ \hat{a}_{1n's_z} \right.$$

$$\left. + F_{nn'}^e(\mathbf{k}) \sum_{s_z = -1/2}^{1/2} s_z \hat{a}_{2ns_z}^+ \hat{a}_{1n's_z} \right.$$

$$\left. + F_{nn'}^e(\mathbf{k}) \sum_{s_z = -1/2}^{1/2} s_z \hat{a}_{2ns_z}^+ \hat{a}_{1n's_z} \right.$$

$$\left. + F_{nn'}^e(\mathbf{k}) \sum_{s_z = -1/2}^{1/2} s_z \hat{a}_{2ns_z}^+ \hat{a}_{1n's_z} \right.$$

$$\left. + F_{nn'}^e(\mathbf{k}) \sum_{s_z = -1/2}^{1/2} s_z \hat{a}_{2ns_z} \right.$$

$$\left. + F_{nn'}^e(\mathbf{k}) \sum_{s_z = -1/2}^{1/2} s_z \hat{a}_{2ns_z} \right] \right] \right]$$

$$\left. + F_{nn'}^e(\mathbf{k}) \sum_{s_z = -1/2}^{1/2} s_z \hat{a}_{2ns_z} \right] \right] \left. + F_{nn'}^e(\mathbf{k}) \sum_{s_z = -1/2}^{1/2} s_z \hat{a}_{2n's_z} \right] \right] \left. + F_{nn'}^e(\mathbf{k}) \sum_{s_z = -1/2}^{1/2} s_z \hat{a}_{2n's_z} \right] \right] \left. + F_{nn'}^e(\mathbf{k}) \sum_{s_z = -1/2}^{1/2} s_z \hat{a}_{2n's_z} \right] \left. + F_{nn'}^e(\mathbf{k}) \sum_{s_z = -1/2}^{1/2} s_z \hat{a}_{2n's_z} \right] \left. + F_{nn's_z}^e(\mathbf{k}) \sum_{s_z = -1/2}^{1/2} s_z \hat{a}_{2n's_z} \right] \right] \left. + F_{nn'}^e(\mathbf{k}) \sum_{s_z = -1/2}^{1/2} s_z \hat{a}_{2n's_z} \right] \left. + F_{nn's_z}^e(\mathbf{k}) \sum_{s_z = -1/2}^{1/2} s_z \hat{a}_{2n's_z} \right] \left. + F_{nn's_z}^e(\mathbf{k}) \sum_{s_z = -1/2}^{1/2} s_z \hat{a}_{2n's_z} \right] \right] \left. + F_{nn's_z}^e(\mathbf{k}) \sum_{s_z = -1/2}^{1/2} s_z \sum_{s_z$$

$$-F_{nn'}^{h}(\mathbf{k}) \sum_{s_{z}=-1/2}^{1/2} s_{z} \hat{a}_{2ns_{z}}^{+} \hat{a}_{1n'-s_{z}} \right]$$

$$+ F_{nn'}^{e}(\mathbf{k}) \left[ \hat{S}_{\mathbf{m}}^{(-)} \hat{a}_{1n1/2}^{+} \hat{a}_{1n'-1/2} + \hat{S}_{\mathbf{m}}^{(+)} \hat{a}_{1n-1/2}^{+} \hat{a}_{1n'1/2} \right]$$

$$+ F_{nn'}^{h}(\mathbf{k}) \left[ \hat{S}_{\mathbf{m}}^{(-)} \hat{a}_{1n-1/2}^{+} \hat{a}_{1n'1/2} + \hat{S}_{\mathbf{m}}^{(+)} \hat{a}_{1n1/2}^{+} \hat{a}_{1n'-1/2} \right]$$

$$+ (F_{nn'}^{e}(\mathbf{k}) + F_{nn'}^{h}(\mathbf{k}))$$

$$\left[ \hat{S}_{\mathbf{m}}^{(-)} \hat{a}_{2n-1/2}^{+} \hat{a}_{2n'1/2} + \hat{S}_{\mathbf{m}}^{(+)} \hat{a}_{2n1/2}^{+} \hat{a}_{2n'-1/2} \right]$$

$$+ F_{nn'}^{e}(\mathbf{k}) \left[ \hat{S}_{\mathbf{m}}^{(-)} \hat{a}_{1n1/2}^{+} \hat{a}_{2n'-1/2} + \hat{S}_{\mathbf{m}}^{(+)} \hat{a}_{1n-1/2}^{+} \hat{a}_{2n'1/2} \right]$$

$$+ F_{nn'}^{h}(\mathbf{k}) \left[ \hat{S}_{\mathbf{m}}^{(-)} \hat{a}_{1n1/2}^{+} \hat{a}_{2n'1/2} + \hat{S}_{\mathbf{m}}^{(+)} \hat{a}_{2n-1/2}^{+} \hat{a}_{2n'-1/2} \right]$$

$$+ F_{nn'}^{e}(\mathbf{k}) \left[ \hat{S}_{\mathbf{m}}^{(-)} \hat{a}_{2n-1/2}^{+} \hat{a}_{1n'-1/2} + \hat{S}_{\mathbf{m}}^{(+)} \hat{a}_{2n-1/2}^{+} \hat{a}_{1n'1/2} \right]$$

$$+ F_{nn'}^{h}(\mathbf{k}) \left[ \hat{S}_{\mathbf{m}}^{(-)} \hat{a}_{2n-1/2}^{+} \hat{a}_{1n'-1/2} + \hat{S}_{\mathbf{m}}^{(+)} \hat{a}_{2n-1/2}^{+} \hat{a}_{1n'1/2} \right]$$

$$+ F_{nn'}^{h}(\mathbf{k}) \left[ \hat{S}_{\mathbf{m}}^{(-)} \hat{a}_{2n-1/2}^{+} \hat{a}_{1n'-1/2} + \hat{S}_{\mathbf{m}}^{(+)} \hat{a}_{2n-1/2}^{+} \hat{a}_{1n'1/2} \right]$$

$$+ \hat{S}_{x,\mathbf{m}} \pm i \hat{S}_{y,\mathbf{m}}. \text{ Zauważmy, że: } F_{nn'}^{e,h}(\mathbf{k})^{*} = F_{nn'}^{e,h}(-\mathbf{k}) \text{ i } F_{nn'}^{e,h}(\mathbf{k} \rightarrow 0$$

 $\begin{array}{l} 0 \\ 0 \end{array} = \tilde{A}_{e \ b}(0) \delta_{nn'}. \end{array}$ 

gdzie:  $\hat{S}_{\mathbf{m}}^{(\pm)}$ 

#### 2.3.2. Hamiltonian fal spinowych w DMS

Dla spinowych operatorów domieszek magnetycznych w DMS  $\hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{m}}$  stosujemy bozonową reprezentację Holsteina–Primakoffa [65, 66] — jak było to przedstawione w poprzednich podrozdziałach. Przy założeniu stanu podstawowego [76, 77], w którym spiny domieszek ustawione są w kierunku pola zewnętrznego, a spiny dziur przeciwnie, dla niskich temperatur mamy dla domieszek:  $\hat{S}_{\mathbf{n}}^{(-)} = \sqrt{2S - \hat{B}_{\mathbf{n}}^{+}\hat{B}_{\mathbf{n}}}\hat{B}_{\mathbf{n}} \simeq \sqrt{2S}\hat{B}_{\mathbf{n}}, \ \hat{S}_{\mathbf{n}}^{(+)} = \hat{B}_{\mathbf{n}}^{+}\sqrt{2S - \hat{B}_{\mathbf{n}}^{+}\hat{B}_{\mathbf{n}}} \simeq \sqrt{2S}\hat{B}_{\mathbf{n}}^{+}, \ \hat{S}_{z,\mathbf{n}} = -S + \hat{B}_{\mathbf{n}}^{+}\hat{B}_{\mathbf{n}}, i dla dziur \hat{S}_{j}^{(-)} = \sqrt{1 - \hat{b}_{j}^{+}\hat{b}_{j}}\hat{b}_{j}} \simeq \hat{b}_{j}, \ \hat{S}_{j}^{(+)} = \hat{b}_{j}^{+}\sqrt{1 - \hat{b}_{j}^{+}\hat{b}_{j}}} \simeq \hat{b}_{j}^{+}, \ \hat{S}_{z,\mathbf{n}} = \frac{1/2 - \hat{b}_{j}^{+}\hat{b}_{j}}{\hat{b}_{j}}}{\langle \hat{b}_{j}^{+} \hat{b}_{j} \rangle} \ll 1$ ):

$$\hat{H}_{pd} \simeq -g_0 \mu_B BSN_i + g_p \mu_B B \frac{1}{2} N_p + S \sum_{j=1}^{N_p} \sum_{\mathbf{n}} A_p(j, n)$$

$$+ \sum_{\mathbf{n}} \left( g_0 \mu_B B - \sum_j A_p(j, n) \right) \hat{B}_{\mathbf{n}}^+ \hat{B}_{\mathbf{n}}$$

$$+ \sum_j \left( -g_p \mu_B B - 2S \sum_{\mathbf{n}} A_p(j, n) \right) \hat{b}_j^+ \hat{b}_j$$

$$(2.59)$$

$$-\sqrt{2S}\sum_{j=1}^{N_p}\sum_{\mathbf{n}}A_p(j,n)(\hat{b}_j\hat{B}_{\mathbf{n}}^+ + \hat{b}_j^+\hat{B}_{\mathbf{n}}) + \hat{H}_p$$

 $(A_p(j,n) = A_p(\mathbf{R}_j - \mathbf{R}_n)).$ 

Przy założeniu, że  $N_i \ll N$  ( $x = N_i/N \ll 1$ ), gdzie  $N_i$  jest liczbą domieszek losowo rozłożonych w krysztale DMS (N jest liczba komórek elementarnych), jak wspominano wyżej, nie wszystkie domieszki biorą udział w magnetycznym uporządkowaniu w DMS, np. w próbkach analizowanych przez autorów prac [86,87] wydaje sie, że tylko około 20% domieszek jest aktywnych, co można uwzglednić poprzez efektywny ich spin,  $S \simeq 0.41$  zamiast S = 2.5 jak powinno być dla Mn. W losowym rozkładzie domieszek magnetycznych (i także centrów akceptorowych) należy uśrednić makroskopowe (termodynamiczne) wielkości mierzalne po wszystkich możliwych rozkładach — według schematu przedstawionego w poprzednich podrozdziałach. Zgodnie z tym schematem uśrednienie energii swobodnej i innych makroskopowych wielkości jest w naszym przypadku tożsame z uśrednieniem hamiltonianu, przy warunku zaniedbania rozproszeń wzbudzeń układu na strukturalnych fluktuacjach rozkładu domieszek, co z kolei jest konsystentne z zachowaniem tylko do kwadratowych członów w operatorach HP w hamiltonianie. Uśrednienie prowadzi równocześnie do modelu ciagłego i restytuuje translacyjna niezmienniczość domieszkowanego kryształu, co z kolei umożliwia pedowa reprezentację wzbudzeń kolektywnych (fal spinowych).

Dla ciągłej reprezentacji operatorów HP  $\hat{B}_{\mathbf{n}}^{(+)}$  (w zgodności ze stosowaną metodą uśredniania [64]) mamy zatem

$$\hat{B}_{\mathbf{n}}^{(+)} = \hat{B}_{\mathbf{R}_{\mathbf{n}}}^{(+)}, \quad [\hat{B}_{\mathbf{R}_{1}}, \hat{B}_{\mathbf{R}_{2}}^{+}] = \frac{v_{0}}{x}\delta(\mathbf{R}_{1} - \mathbf{R}_{1}).$$

Podobnie dla operatorów HP dla dziur pasmowych:  $\hat{b}_{j}^{(+)} = \hat{b}_{\mathbf{R}_{n}}^{(+)}$  możemy również przejść do ciągłej reprezentacji, wtedy  $[\hat{b}_{\mathbf{R}_{1}}, \hat{b}_{\mathbf{R}_{2}}^{+}] = \frac{v_{0}}{x_{p}} \delta(\mathbf{R}_{1} - \mathbf{R}_{1})$ . Dla operatorów  $\hat{B}^{(+)}(\mathbf{r})$  i  $\hat{b}^{(+)}(\mathbf{r})$  można teraz przejść do ich fourierowskiej reprezentacji

$$\hat{B}^{(+)}(\mathbf{r}) = \frac{v_0}{(2\pi)^3 \sqrt{x}} \int d^3 k e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \hat{B}^{(+)}(\mathbf{k}), \qquad (2.60)$$

i  $[\hat{B}(\mathbf{k}), \hat{B}^+(\mathbf{k}')] = \frac{(2\pi)^3}{v_0} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}');$ 

$$\hat{b}^{(+)}(\mathbf{r}) = \frac{v_0}{(2\pi)^3 \sqrt{x_p}} \int d^3 k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{b}^{(+)}(\mathbf{k}), \qquad (2.61)$$

i  $[\hat{b}(\mathbf{k}), \hat{b}^+(\mathbf{k}')] = \frac{(2\pi)^3}{v_0} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}').$ 

Rezultat uśrednienia spinowych operatorów po losowych rozkładach magnetycznych domieszek w DMS i stanach dziurowych oraz losowych położeniach centrów akceptorowych w DMS można zestawić w następujący sposób. Dla spinowych operatorów HP domieszek zgodnie z definicją uśrednienia po losowych rozkładach tych domieszek:

$$\overline{\sum_{l} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_{l}}\hat{B}_{l}} = \sqrt{x}\hat{B}(\mathbf{k}), \quad \overline{\sum_{l} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_{l}}\hat{B}_{l}^{+}} = \sqrt{x}\hat{B}^{+}(-\mathbf{k}), \\
\overline{\sum_{l} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_{l}}} = \frac{x}{v_{0}}(2\pi)^{3}\delta(\mathbf{k}), \\
\overline{\sum_{l} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_{l}}\hat{B}_{l}^{+}}\hat{B}_{l} = \frac{v_{0}}{(2\pi)^{3}}\int d^{3}k'\hat{B}^{+}(\mathbf{k}')\hat{B}(\mathbf{k}'+\mathbf{k}), \\
\overline{\sum_{l} \hat{B}_{l}^{+}}\hat{B}_{l}} = \frac{v_{0}}{(2\pi)^{3}}\int d^{3}k'\hat{B}^{+}(\mathbf{k}')\hat{B}(\mathbf{k}'), \\$$
(2.62)

podobnie dla spinowych operatorów HP dziur (po rozkładach akceptorów i uśrednieniu po stanie podstawowym dziur):

$$\overline{\sum_{j} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_{l}}\hat{b}_{j}} = \sqrt{x_{p}}\hat{b}(\mathbf{k}), \quad \overline{\sum_{j} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_{l}}\hat{b}_{j}^{+}} = \sqrt{x_{p}}\hat{b}(-\mathbf{k}),$$

$$\overline{\sum_{j} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_{j}}} = \frac{x_{p}}{v_{0}}(2\pi)^{3}\delta(\mathbf{k}),$$

$$\overline{\sum_{j} e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_{j}}\hat{b}_{j}^{+}}\hat{b}_{j}^{-} = \frac{v_{0}}{(2\pi)^{3}}\int d^{3}k'\hat{b}^{+}(\mathbf{k}')\hat{b}(\mathbf{k}'+\mathbf{k}),$$

$$\overline{\sum_{j} \hat{b}_{j}^{+}}\hat{b}_{j}^{-} = \frac{v_{0}}{(2\pi)^{3}}\int d^{3}k'\hat{b}^{+}(\mathbf{k}')\hat{b}(\mathbf{k}'),$$

$$\overline{\sum_{j} A(\mathbf{R}_{j} - \mathbf{R}_{n})} = \sqrt{N_{i}N_{p}}\sqrt{xx_{p}}\tilde{A}(0),$$

$$\overline{\sum_{jn} A(\mathbf{R}_{j} - \mathbf{R}_{n})\hat{b}_{n}^{+}}\hat{b}_{n}^{-} = \frac{v_{0}}{(2\pi)^{3}}\tilde{A}(0)\int d^{3}k\hat{b}_{k}^{+}\hat{b}_{k},$$

$$\overline{\sum_{jn} A(\mathbf{R}_{j} - \mathbf{R}_{n})\hat{b}_{j}^{+}}\hat{b}_{j}^{-} = x\frac{v_{0}}{(2\pi)^{3}}\tilde{A}(0)\int d^{3}k\hat{b}^{+}(\mathbf{k})\hat{b}(\mathbf{k}),$$

$$\overline{\sum_{jn} A(\mathbf{R}_{j} - \mathbf{R}_{n})[\hat{b}_{j}\hat{B}_{n}^{+} + \hat{b}_{j}^{+}\hat{B}_{n}]}$$

$$= \sqrt{x_{p}x}\frac{v_{0}}{(2\pi)^{3}}\int d^{3}k\left[\tilde{A}^{*}(\mathbf{k})\hat{b}(\mathbf{k})\hat{B}^{+}(\mathbf{k}) + \tilde{A}(\mathbf{k})\hat{b}^{+}(\mathbf{k})\hat{B}(\mathbf{k})\right],$$

gdzie tylda oznacza transformatę Fouriera. Używając podanych formuł, można uśrednić hamiltoniany  $\hat{H}_{sd}$ i $\hat{H}_{pd}$ 

$$\begin{split} \overline{\hat{H}_{sd}} &= 2xS\beta_{0}\sum_{ns_{z}} \left\{ [\tilde{A}_{e}(0) - \tilde{A}_{h}(0)] \hat{a}_{2ns_{z}}^{+} \hat{a}_{2ns_{z}} + \tilde{A}_{e}(0) \hat{a}_{1ns_{z}}^{+} \hat{a}_{2ns_{z}} \\ &+ [\tilde{A}_{e}(0) - \tilde{A}_{h}(0)] \hat{a}_{2ns_{z}}^{+} \hat{a}_{2ns_{z}} + \tilde{A}_{e}(0) \hat{a}_{2ns_{z}}^{+} \hat{a}_{2ns_{z}} - \tilde{A}_{h}(0) \hat{a}_{2ns_{z}}^{+} \hat{a}_{1n-s_{z}} \right\} \\ &- 2\beta_{0} \frac{v_{0}}{(2\pi)^{3}} \int d^{3}k' d^{3}k'' \hat{B}^{+}(\mathbf{k}'') \hat{B}(\mathbf{k}'' + \mathbf{k}') \sum_{nn's_{z}} s_{z} \\ &\left\{ [F_{nn'}^{e}(\mathbf{k}') - F_{nn'}^{h}(\mathbf{k}')] \hat{a}_{1ns_{z}}^{+} \hat{a}_{1n's_{z}} \\ &+ [F_{nn'}^{e}(\mathbf{k}') + F_{nn'}^{h}(\mathbf{k}')] \hat{a}_{2ns_{z}}^{+} \hat{a}_{2n's_{z}} \\ &+ [F_{nn'}^{e}(\mathbf{k}') \hat{a}_{1ns_{z}}^{+} \hat{a}_{2n's_{z}} + F_{nn'}^{h}(\mathbf{k}') \hat{a}_{2ns_{z}}^{+} \hat{a}_{2n'-s_{z}} \\ &+ F_{nn'}^{e}(\mathbf{k}') \hat{a}_{2ns_{z}}^{+} \hat{a}_{1n's_{z}} - F_{nn'}^{h}(\mathbf{k}') \hat{a}_{2ns_{z}}^{+} \hat{a}_{1n'-s_{z}} \\ &- \sqrt{2Sx}\beta_{0} \frac{v_{0}}{(2\pi)^{3}} \int d^{3}k \sum_{nn'} \left\{ \hat{B}(\mathbf{k}) \left[ F_{nn'}^{e}(\mathbf{k}) \left( \hat{a}_{1n+\frac{1}{2}}^{+} \hat{a}_{1n'-\frac{1}{2}} \\ &- \sqrt{2Sx}\beta_{0} \frac{v_{0}}{(2\pi)^{3}} \int d^{3}k \sum_{nn'} \left\{ \hat{B}(\mathbf{k}) \left[ F_{nn'}^{e}(\mathbf{k}) \left( \hat{a}_{1n+\frac{1}{2}}^{+} \hat{a}_{1n'-\frac{1}{2}} \\ &+ \hat{a}_{2n\frac{1}{2}}^{+} \hat{a}_{2n'-\frac{1}{2}} + \hat{a}_{1n+\frac{1}{2}}^{+} \hat{a}_{2n'-\frac{1}{2}} + \hat{a}_{2n\frac{1}{2}}^{+} \hat{a}_{2n'-\frac{1}{2}} \\ &+ \hat{a}_{nn'}^{+}(\mathbf{k}) \left( \hat{a}_{1n-\frac{1}{2}}^{+} \hat{a}_{1n'-\frac{1}{2}} \\ &+ \hat{a}_{2n-\frac{1}{2}}^{+} \hat{a}_{2n'\frac{1}{2}} + \hat{a}_{1n-\frac{1}{2}}^{+} \hat{a}_{2n'\frac{1}{2}} + \hat{a}_{2n-\frac{1}{2}}^{+} \hat{a}_{1n'\frac{1}{2}} \\ &+ \hat{a}_{2n-\frac{1}{2}}^{+} \hat{a}_{2n'\frac{1}{2}} + \hat{a}_{1n-\frac{1}{2}}^{+} \hat{a}_{2n'-\frac{1}{2}}^{+} \hat{a}_{2n'\frac{1}{2}}^{+} \hat{a}_{1n'\frac{1}{2}} \\ &+ \hat{a}_{2n-\frac{1}{2}}^{+} \hat{a}_{2n'\frac{1}{2}} + \hat{a}_{1n-\frac{1}{2}}^{+} \hat{a}_{2n'-\frac{1}{2}}^{+} \hat{a}_{2n'\frac{1}{2}}^{+} \hat{a}_{1n'\frac{1}{2}} \\ &+ \hat{a}_{2n-\frac{1}{2}}^{+} \hat{a}_{2n'\frac{1}{2}} + \hat{a}_{1n-\frac{1}{2}}^{+} \hat{a}_{2n'\frac{1}{2}} + \hat{a}_{2n-\frac{1}{2}}^{+} \hat{a}_{2n'\frac{1}{2}}^{+} \hat{a}_{2n'\frac{1$$

Podobnie

$$\overline{\hat{H}_{pd}} = -g_0 \mu_B BSN_i + g_p \mu_B B \frac{1}{2} N_p + \sqrt{N_i N_p x x_p} S \tilde{A}_p(0) + \sum_j \frac{\hbar^2 k_j^2}{2m_h^*} + \frac{v_0}{(2\pi)^3} \int d^3 k \hat{H}_{pd}(\mathbf{k}),$$
(2.65)

Ζ

$$\hat{H}_{pd}(\mathbf{k}) = \varepsilon_d \hat{B}^+(\mathbf{k}) \hat{B}(\mathbf{k}) + \varepsilon_p \hat{b}^+(\mathbf{k}) \hat{b}(\mathbf{k}) + \gamma_p(\mathbf{k}) [\hat{b}(\mathbf{k}) \hat{B}^+(\mathbf{k}) + \hat{b}^+(\mathbf{k}) \hat{B}(\mathbf{k})], \varepsilon_d(\mathbf{k}) = g_0 \mu_B B - x_p \tilde{A}_p(0),$$

$$\varepsilon_p(\mathbf{k}) = -g_p \mu_B B - x2S\tilde{A}_p(0), \gamma(\mathbf{k}) = -\sqrt{2Sx_p x}\tilde{A}_p(\mathbf{k})$$

Zauważmy, że  $\tilde{A}_p(\mathbf{k}) = \tilde{A}_p(-\mathbf{k}) = \tilde{A}_p^*(\mathbf{k}).$ 

### 2.3.3. Obraz fal spinowych dla magnetycznego podukładu w DMS

Hamiltonian (2.65) może być zdiagonalizowany przez kanoniczną transformację typu Bogolubova, opisaną w jednym z poprzednich podrozdziałów

$$\hat{B}(\mathbf{k}) = v_k \hat{\alpha}_1(\mathbf{k}) + u_k \hat{\alpha}_2(\mathbf{k}), 
\hat{b}(\mathbf{k}) = u_k \hat{\alpha}_1(\mathbf{k}) - v_k \hat{\alpha}_2(\mathbf{k}),$$
(2.66)

gdzie $u_k^2+v_k^2=1$ i przedstawiony w postaci diagonalnej:

$$\hat{H}_{pd}(\mathbf{k}) = \varepsilon_1(\mathbf{k})\hat{\alpha}_1(\mathbf{k})^{\dagger}\hat{\alpha}_1(\mathbf{k}) + \varepsilon_2(\mathbf{k})\hat{\alpha}_2(\mathbf{k})^{\dagger}\hat{\alpha}_2(\mathbf{k})$$

gdzie *bozonowe* operatory  $\hat{\alpha}_1(\mathbf{k})$ ,  $\hat{\alpha}_2(\mathbf{k})$  to operatory fal spinowych i odpowiadające im relacje dyspersji  $\varepsilon_1(\mathbf{k})$ ,  $\varepsilon_2(\mathbf{k})$  mają postać:

$$\varepsilon_{1,2}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} [\varepsilon_p + \varepsilon_d] \pm \frac{1}{2} \sqrt{[\varepsilon_p - \varepsilon_d]^2 + 4\gamma^2(\mathbf{k})}, \qquad (2.67)$$

 $\mathbf{Z}$ 

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \sqrt{1 - \frac{4\gamma^2 \left(\mathbf{k}\right)}{\left[\varepsilon_1 \left(\mathbf{k}\right) - \varepsilon_2 \left(\mathbf{k}\right)\right]^2}} \right\},$$

$$v_k^2 = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \sqrt{1 - \frac{4\gamma^2 \left(\mathbf{k}\right)}{\left[\varepsilon_1 \left(\mathbf{k}\right) - \varepsilon_2 \left(\mathbf{k}\right)\right]^2}} \right\}.$$
(2.68)

Dla zerowego zewnętrznego pola magnetycznego i dla małych  $k \ (kl_{ex} \ll 1)$ dyspersję fal spinowych zapisujemy w postaci  $\varepsilon_1(\mathbf{k}) = -\tilde{A}_h(0)(x_p + x2S) - Dk^2$ ,  $\varepsilon_2(\mathbf{k}) = Dk^2$ , gdzie D zależy od koncentracji domieszek i dziur (2.37). Są tu dwie gałęzie fal spinowych (jak w ferrimagnetyku): bezszczelinowa  $\varepsilon_2(\mathbf{k})$  $(\varepsilon_2(0) = 0)$  i ze szczeliną  $\varepsilon_1(\mathbf{k})$ .

Należy także wyrazić hamiltonian  $\widehat{H}_{sd}$  przez operatory  $\hat{\alpha}_1(\mathbf{k})$ ,  $\hat{\alpha}_2(\mathbf{k})$ . W rezultacie znajdujemy efektywny hamiltonian całego rozpatrywanego układu w postaci:

$$\hat{H}_{eff} = \overline{\hat{H}} = E_0 + \hat{H}_0 + \hat{H}_1, \qquad (2.69)$$

$$E_0 = -g_0 \mu_B B S N_i - \beta_0 S^2 N_i, \qquad (2.70)$$

$$\hat{H}_0 = \sum_{jns_z} \epsilon_{jns_z} \hat{a}^+_{jns_z} \hat{a}_{jns_z} + x \frac{v_0}{(2\pi)^3} \sum_i \int d^3k \varepsilon_i(\mathbf{k}) \hat{\alpha}^+_i(\mathbf{k}) \hat{\alpha}_i(\mathbf{k}), \qquad (2.71)$$

gdzie:  $\epsilon_{jns_z} = E_n + (g_e - (+)g_h)\mu_B Bs_z + 2xS[\tilde{A}_e(0) - \tilde{A}_h(0)]s_z + \Delta$ , i  $\varepsilon_i(\mathbf{k})$  są dane przez zależność (2.67);  $E_0$  jest energią stanu podstawowego swobodnych dziur pasmowych, a dwa spinowe podukłady DMS (domieszek i dziur) oddziałują wymiennie. Diagonalna część efektywnego hamiltonianu  $\hat{H}_0$  jest sumą energii dwóch typów wzbudzeń elementarnych w układzie: ekscytonów zlokalizowanych w kropce (ze zgodnym i przeciwnym ustawieniem spinów w parze  $e^{-h}$ ) i dwóch rodzajów magnonów w DMS (bezszczelinowych i ze szczeliną — zwanych optycznymi w analogii do fononów LO). Ostatni człon  $\hat{H}_1 = \overline{\hat{H}}_{sd}$  (równanie (2.64)) z operatorami wyrażonymi przez transformację diagonalizującą (2.66) opisuje oddziaływanie pomiędzy tymi elementarnymi wzbudzeniami układu, uwzględniając efekty:

— oddziaływania ekscytonu w kropce z magnonami (falami spinowymi) przy udziale dwóch magnonów (kreacja i anihilacja); co ważne — znajduje się tu człon oddziaływania bez żadnej zmiany projekcji spinów pary e-h,

— procesy związane z pochłonięciem lub wypuszczeniem (wytworzeniem) magnonu (jednomagnonowe procesy) i równoczesną zmianą spinu ekscytonu (procesy *spin-flip*).

Należy tu podkreślić, że taka złożona struktura oddziaływania fal spinowych (magnonów) z ekscytonem w kropce odróżnia tę sytuację od oddziaływania fononów z ekscytonem w kropce (opisanego w części pierwszej) — w przypadku magnonów należy bowiem uwzględnić zasadę zachowania spinu, czego nie ma w przypadku fononów.

# 2.3.4. Ubieranie ekscytonu w kropce w magnony z DMS — hamiltonian $s{-}d$

Hamiltonian oddziaływania ekscytonu w kropce z domieszkami magnetycznymi  $\hat{H}_{sd}$ można zapisać w postaci:

$$\hat{H}_{sd} = \hat{H}_{sd}^1 + \hat{H}_{sd}^2, \tag{2.72}$$

80

 $\mathbf{Z}$ 

gdzie

$$\begin{split} \hat{H}_{sd}^{1} &= -\left(\frac{v_{0}}{(2\pi)^{3}}\right)^{2} 2Sx\beta_{0} \int d^{3}k_{1} \int d^{3}k_{2} \\ & \left[v_{\mathbf{k}_{2}}\hat{\alpha}_{1}^{+}(\mathbf{k}_{2}) + u_{\mathbf{k}_{2}}\hat{\alpha}_{2}^{+}(\mathbf{k}_{2})\right] \\ & \left[v_{\mathbf{k}_{2}+\mathbf{k}_{1}}\hat{\alpha}_{1}(\mathbf{k}_{2}+\mathbf{k}_{1}) + u_{\mathbf{k}_{2}+\mathbf{k}_{1}}\hat{\alpha}_{2}(\mathbf{k}_{2}+\mathbf{k}_{1})\right] \\ & \sum_{n,n'}\sum_{s_{z}=-1/2}^{1/2} s_{z} \left\{ \left[F_{nn'}^{e}(\mathbf{k}_{1}) - F_{nn'}^{h}(\mathbf{k}_{1})\right]\hat{a}_{1ns_{z}}^{+}\hat{a}_{1n's_{z}} \right. \right. \tag{2.73} \\ & + \left[F_{nn'}^{e}(\mathbf{k}_{1}) + F_{nn'}^{h}(\mathbf{k}_{1})\right]\hat{a}_{2ns_{z}}^{+}\hat{a}_{2n's_{z}} \\ & + \left[F_{nn'}^{e}(\mathbf{k}_{1})\hat{a}_{1ns_{z}}^{+}\hat{a}_{2n's_{z}} + hc\right] \\ & + \left[F_{nn'}^{h}(\mathbf{k}_{1})\hat{a}_{1ns_{z}}^{+}\hat{a}_{2n'-s_{z}} + hc\right] \\ & + \left[F_{nn'}^{e}(\mathbf{k})\hat{a}_{1ns_{z}}^{+}\hat{a}_{2n'-s_{z}} + hc\right] \right\}, \end{split} \\ \hat{H}_{sd}^{2} &= -\sqrt{2Sx}\beta_{0}\frac{v_{0}}{(2\pi)^{3}}\int d^{3}k\sum_{n,n'}\left\{\left[v_{\mathbf{k}}\hat{\alpha}_{1}(\mathbf{k}) + u_{\mathbf{k}}\hat{\alpha}_{2}(\mathbf{k})\right] \\ & \left[F_{nn'}^{e}(\mathbf{k})\left(\hat{a}_{1n1/2}^{+}\hat{a}_{1n'-1/2} + \hat{a}_{2n1/2}^{+}\hat{a}_{2n'-1/2} \\ & +\hat{a}_{1n1/2}^{+}\hat{a}_{2n'-1/2} + \hat{a}_{2n1/2}^{+}\hat{a}_{1n'-1/2}\right) \\ & + F_{nn'}^{h}(\mathbf{k})\left(\hat{a}_{1n-1/2}^{+}\hat{a}_{1n'-1/2}\right)\right] + hc \right\}. \end{split}$$

Pierwszy człon  $\hat{H}_{sd}^1$  odpowiada oddziaływaniu ekscytonu z falami spinowymi przy udziale  $dw \delta ch$  magnonów (w członie tym występują równocześnie operatory kreacji i anihilacji magnonu). W członie tym znajduje się element oddziaływania bez zmiany spinu ekscytonu pary e-h (równocześnie występujące operatory kreacji i anihilacji magnonu kompensują wzajemnie zmiany spinu i spin nie jest przejmowany od magnonów przez ekscyton). Drugi człon  $\hat{H}_{sd}^2$  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.

Poszukujemy członu hamiltonianu, który nie zmienia stanu podstawowego ekscytonu — taki człon prowadzi do czystego defazowania, którym się tu zajmujemy. Pozostałe człony, ze zmianą stanu prowadzą do relaksacji, czyli amplitudowej dekoherencji (przeskoki między stanami ekscytonu). Niezmieniający stanu człon występuje tylko w  $\hat{H}_{sd}^1$ , jest on dwuoperatorowy w odniesieniu do magnonów i ekscytonu — odpowiadający mu wierzchołek jest zatem czworokątem (a nie



Rysunek 2.4. Wkłady do operatora masowego: pierwszego rzędu (lewy), drugiego rzędu — pochodzące od  $\hat{H}_{sd}^2$  (prawy) i od  $\hat{H}_{sd}^1$  (środkowy)

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 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 w tym przypadku jednak do czystego defazowania ekscytonu, ale do jego relaksacyjnych (amplitudowych) przejść (dekoherencji amplitudowej).

Obecność w członie  $\hat{H}^1_{sd}$  diagonalnego oddziaływania o wierzchołku czworokątnym, prowadzi do zmiany struktury operatora masowego (w porównaniu z fononami i trójkatnymi wierzchołkami). Graf pierwszego rzedu (rys. 2.4) względem oddziaływania (z zamknieta pętla magnonowa) nie wnosi wkładu do urojonej części operatora masowego — opisuje on tylko rzeczywiste przesuniecie energetyczne ekscytonu wywołane przez magnetyzacje (magnonowa). Jest to zależne od temperatury przesunięcie stanów ekscytonu, rozszczepionych silnie i poprzesuwanych przez całkowitą spontaniczną magnetyzację DMS (poniżej temperatury krytycznej) — magnony wnoszą do tej magnetyzacji niewielką poprawkę, którą oszacowaliśmy w pobliżu T = 0 i porównaliśmy z danymi eksperymentalymi [31,62]. Graf taki nie prowadzi do defazowania, ponieważ odpowiednia składowa operatora masowego nie ma części urojonej (funkcja korelacyjna opisująca defazowanie wiąże się przez transformatę Fouriera tylko z urojoną częścią funkcji Greena (intensywnością spektralną) i zatem z urojoną częścią operatora masowego). Urojony wkład do operatora masowego pochodzi od grafu drugiego rzędu względem oddziaływania (czworokatnego) (rys. 2.4) — ten graf opisuje czyste defazowanie ekscytonu.

Drugi człon hamiltonianu  $\hat{H}_{sd}^2$  (z trójkątnymi wierzchołkami) nie wnosi żadnego wkładu do *czystego defazowania ekscytonu* — chociaż również wnosi urojone składowe do operatora masowego ekscytonu, ale nie do diagonalnej jego części (niediagonalne urojone składowe operatora masowego opisują defazowanie zmieszane z równoczesną amplitudową dekoherencją stanów, nie dotyczą jednak czystego defazowania).

Liniowy względem czworokątnego wierzchołka człon w operatorze masowym określa przesunięcie enegetyczne poziomów ekscytonu (w szczególności podstawo-

wego):

$$\epsilon_{1(2)ns_z} = E_n + \Delta + (g_e - (+)g_h)\mu_B s_z B + 2s_z S x_i \beta_0 \left[ \tilde{A}_e(0) - (+)\tilde{A}_h(0) \right] m_i(B,T),$$
(2.75)

gdzie

$$m_i(B,T) = 1 - \frac{v_0}{S(2\pi)^3} \int d^3k \left[ v_{\mathbf{k}}^2 n_1(\mathbf{k}) + u_{\mathbf{k}}^2 n_2(\mathbf{k}) \right]$$
(2.76)

(dla  $\tilde{A}_e(0) > 0$ ,  $\tilde{A}_h(0) < 0$  i  $|\tilde{A}_e(0)| < |\tilde{A}_h(0)|$  mamy następującą kolejność stanów ekscytonowych w kropce w uporządkowanej fazie DMS,  $\epsilon_{1n-1/2} < \epsilon_{2n1/2} < \epsilon_{2n-1/2} < \epsilon_{1n1/2}$ ). W pobliżu T = 0, dla materiału Zn<sub>0,75</sub>Mn<sub>0,25</sub>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 Zn<sub>0,75</sub>Mn<sub>0,25</sub>Se/CdSe — tab. 2.2 (dopasowanie do eksperymental-nych wyników).

# 2.4. Obliczanie operatora masowego i jego urojonej części dla wielokątnych wierzchołków

Funkcja Greena–Matsubary (FGM) dla czasu urojonego ma postać [15,16]:

$$\mathcal{G}^{\eta}_{\hat{A},\hat{B}}(\tau_1 - \tau_2) = - << T_{\eta}\hat{A}(\tau_1)\hat{B}(\tau_2) >>, \qquad (2.77)$$

gdzie  $\hat{A}(\tau) = e^{\tau \hat{H}} \hat{A} e^{-\tau \hat{H}}$  jest obrazem Heisenberga od urojonego czasu  $t = -i\tau$ ,  $T_{\eta}$  jest operatorem chronologizacji względem czasu  $\tau$  ( $\eta = 1$  dla bozonów,  $\eta = -1$ dla fermionów),  $T_{\eta} \hat{A}(\tau_1) \hat{B}(\tau_2) = \Theta(\tau_1 - \tau_2) \hat{A}(\tau_1) \hat{B}(\tau_2) + \eta \Theta(\tau_2 - \tau_1) \hat{B}(\tau_2) \hat{A}(\tau_1);$  $<< \ldots >> = Tr \frac{1}{Q} e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} \dots, \quad Q = Tr e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}, \quad \beta = 1/kT.$ 

Gdy operatory  $\hat{A}, \hat{B}$  są operatorami anihilacji i kreacji, wówczas FGM nazywana jest jednocząstkową i jej składowa fourierowska (składowa szeregu Fouriera — FGM określona jest na odcinku  $[-\beta, \beta]$ ) dla układów swobodnych (bez oddziaływania) ma postać [15] ( $\hbar = 1$ ):

$$\mathcal{G}^{\eta}_{\hat{a}_{i},\hat{a}_{j}^{+}}(\omega_{\nu}) = \frac{\delta_{ij}}{i\omega_{\nu} - E_{i}}, \quad \begin{cases} i\omega_{\nu} = i\frac{\pi}{\beta}2\nu, \, \nu \in Z & \text{dla } \eta = 1\\ i\omega_{\nu} = i\frac{\pi}{\beta}(2\nu + 1), \, \nu \in Z & \text{dla } \eta = -1. \end{cases}$$
(2.78)

Przedłużenie analityczne  $\mathcal{G}^{\eta}_{\hat{a}_i,\hat{a}_j^+}(\omega_{\nu})$  na płaszczyźnie zespolonej jest równe meromorficznej funkcji — transformacie Fouriera retardowanej (górna półpłaszczy-



Rysunek 2.5. Graficzny zapis równania Dysona

zna) i adwansowanej (dolna półpłaszczyzna) funkcji Greena (komutacyjnej dla $\eta=1,$ antykomutacyjnej dla $\eta=-1)$ 

$$G_{\hat{a}_{i},\hat{a}_{j}^{+}}^{\eta,r(a)}(t) = \pm \Theta(\pm t) << [a_{i}(t), a_{j}(0)]_{-\eta} >> ,$$

$$\mathcal{G}_{\hat{a}_{i},\hat{a}_{j}^{+}}^{\eta}(i\omega_{\nu} \to E = \omega + i\Gamma) = 2\pi i G_{\hat{a}_{i},\hat{a}_{j}^{+}}^{\eta}(E),$$

$$G_{\hat{a}_{i},\hat{a}_{j}^{+}}^{\eta}(E) = \int d\omega \frac{I_{\hat{a}_{i},\hat{a}_{j}^{+}}(\omega)(e^{\beta\omega} - 1)}{E - \omega}.$$
(2.79)

Intensywność spektralna  $I_{\hat{a}_i,\hat{a}_j^+}(\omega)$  jest transformatą Fouriera funkcji korelacyjnej używanej przez nas do opisu defazowania, i wyraża się przez urojoną część  $G^{\eta}_{\hat{a}_i,\hat{a}_i^+}(E)$ .

Funkcja FGM może być obliczona metodami graficznymi (grafy Feynmana, co możliwe jest dla niezerowych temperatur po wprowadzeniu czasu urojonego [15,16]) i po analitycznym przedłużeniu, pozwala na znalezienie retardowanej (adwansowanej) funkcji Greena, która ma interpretację fizyczną — uogólnionej podatności, zgodnie z *teorią liniowej reakcji Kubo* [15,91]. W przypadku jednocząstkowej funkcji, bieguny jej transformaty fourierowskej określają kwazicząstki w układzie. Metody graficzne dla FGM (bazujące na twierdzeniu Wicka) [15,16] pozwalają w kontrolowany perturbacyjny (względem oddziaływania) sposób znaleźć FGM dla układów cząstek z oddziaływaniem.

Jeżeli graficznie przedstawić w postaci grubej skierowanej linii *pełną* (z oddziaływaniem) FGM, a cienką linią *gołą* (bez oddziaływania) FGM, a oddziaływanie (w reprezentacji oddziaływania od czasu urojonego, czyli reprezentacji Heisenberga bez oddziaływania) w postaci *gołego* wierzchołka, to spełnione jest równanie Dysona [15, 16], którego interpretacja graficzna jest przedstawiona na rys. 2.5:

$$\mathcal{G}^{\eta}(i.j,\omega_{\nu}) = \mathcal{G}^{(0)\eta}(i.j,\omega_{\nu}) + \sum_{i',j'} \mathcal{G}^{(0)\eta}(i.i',\omega_{\nu}) \Sigma(i',j',\omega_{\nu}) \mathcal{G}^{\eta}(j'.j,\omega_{\nu}), \quad (2.80)$$

gdzie  $\Sigma(i', j', \omega_{\nu})$  jest operatorem masowym. Równanie Dysona jest diagonalne w częstościach, co wynika z jednorodności czasu (urojonego) i może być diagonalne w indeksach cząstkowych i, j w wyniku symetrii, diagonalizacji (jak w naszym

przypadku fal spiniowych) lub przybliżeń. W przypadku diagonalnym równanie Dysona można przepisać w postaci:

$$\mathcal{G}^{\eta}(i.\omega_{\nu}) = \frac{1}{(\mathcal{G}^{(0)\eta}(i.\omega_{\nu}))^{-1} - \Sigma(i,\omega_{\nu})} = \frac{1}{i\hbar\omega_{\nu} - E_i - \Sigma(i,\omega_{\nu})},$$
(2.81)

co prowadzi do prostych przedłużeń analitycznych. Decydująca rola operatora masowego (jego urojonej części) dla określenia urojonej części transformaty Fouriera FG retardowanej (adwansowanej) — intensywności spektralnej, wynika ze związku (1.15):  $G_{\rm r}(0,0,\omega) = \frac{1}{\hbar\omega - E_0 - \Delta(\omega) + i\gamma(\omega) + i\epsilon} = \frac{a^{-1}}{x + i\gamma'(x) + i\epsilon}$ , z reziduum w biegunie  $a = 1 - \frac{d\Delta(\omega)}{\hbar d\omega}|_{\omega = \tilde{E}'_0}$ ,  $\Sigma = \Delta - i\gamma$ ,  $\gamma'(x) = \gamma(x)/a$  (x zrenormalizowane,  $x = \hbar\omega - \tilde{E}'_0$ ,  $\tilde{E}'_0 = \tilde{E}_0/a$ ),  $\epsilon = 0^+$ . Urojona część FG ma postać (1.17):  ${\rm Im}G_{\rm r}(0,0,\omega) = -a^{-1}\pi\delta(x) - \frac{a^{-1}\gamma'(x)/x^2}{1+(\gamma'(x)/x)^2}$  (i funkcja korelacyjna  $I(t) = -\frac{\hbar}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega {\rm Im}G_{\rm r}(0,0,\omega)e^{-i\omega t}$ ).

Operator masowy i w szczególności jego część urojona zależą istotnie od wierzchołka oddziaływania (rys. 2.4). Zaciemnione wierzchołki to efektywne wierzchołki — grafy, których nie można przeciąć przez 2 (3) linie. Jeśli występują równocześnie obydwa wierzchołki, to należy sumować wkłady obu typów do operatora masowego i równania nie są dokładne, gdyż wzajemne powiązania wierzchołków zmieniają strukturę równań — wtedy należy posługiwać się kontrolowanymi przybliżeniami względem oddziaływania.

# 2.4.1. Operator masowy w najniższym przybliżeniu dla wielokątnych wierzchołków

Obliczmy dwa grafy dla operatora masowego przedstawione na rys. 2.7. Odpowiadające górnemu grafowi wyrażenie analityczne ma postać:

$$\frac{1}{\beta} \sum_{iji'j'} v(k;ii') v(jj';l) \sum_{\omega_{\nu_1},\omega_{\nu_2};\omega_{\nu_1}+\omega_{\nu_2}=\omega_{\nu}} \mathcal{G}_{ij}(\omega_{\nu_1}) \mathcal{G}_{i'j'}(\omega_{\nu_2}),$$
(2.82)

a dolnemu:

$$\frac{1}{\beta} \sum_{iji'j'} v(ki;i') v(j';jl) \sum_{\omega_{\nu_1},\omega_{\nu_2};\omega_{\nu_2}=\omega_{\nu_1}+\omega_{\nu}} \mathcal{G}_{ji}(\omega_{\nu_1}) \mathcal{G}_{i'j'}(\omega_{\nu_2}).$$
(2.83)

Jeśli za FGM przyjąć gołe FGN  $\left(\mathcal{G}_{ij}^{(0)}(\omega_{\nu}) = \frac{\delta_{ij}}{i\omega_{\nu} - \epsilon_i}\right)$ , to należy obliczyć wyrażenie dla górnego grafu,

$$\frac{1}{\beta} \sum_{\nu_1} \frac{1}{i\omega_{\nu} - \epsilon_i} \frac{1}{i\omega_{\nu} - i\omega_{\nu_1} - \epsilon_{i'}}$$
(2.84)



w obrazie oddziaływania  $\tilde{v}(\tau') = \sum_{i_1 i_2 i_3} \left\{ v(i_1 i_2 i_3) \tilde{a}_{i_1}^+(\tau') \tilde{a}_{i_2}(\tau') \tilde{\alpha}_{i_3}(\tau') + hc \right\}$ 

Rysunek 2.6. Wierzchołek trójkątny w matsubarowskiej reprezentacji oddziaływania (linia ciągła — ekscyton, linia przerywana — fonon)

i podobnie dla dolnego grafu:

$$\frac{1}{\beta} \sum_{\nu_2} \frac{1}{i\omega_{\nu} + \omega_{\nu_2} - \epsilon_i} \frac{1}{i\omega_{\nu_2} - \epsilon_{i'}},\tag{2.85}$$

linia przerywana — FGM fononowa i odpowiednia energia  $\epsilon$  to energia fononu, linia ciągła — FGM ekscytonowa i odpowiednia energia  $\epsilon$  to energia ekscytonu, podobnie indeksy stanów fononowych to pędy, a dla ekscytonu to komplet liczb kwantowych ekscytonu w kropce — odpowiednio dla indeksów i, j, k, l. Otrzymane wyrażenia mają postać splotu fourierowskiego

$$\frac{1}{\beta} \sum_{\nu_1} f(\omega_\nu - \omega_{\nu_1}) g(\omega_\nu) = \int_0^\beta e^{i\omega_\nu \tau} f(\tau) g(\tau) d\tau, \qquad (2.86)$$

i dla FGM w zależności od czasu urojonego i dla  $\eta = 1$  (bozonów)

$$\mathcal{G}_{ij}^{(0)}(\tau) = -\delta_{ij} \left[ n_i + \Theta(\tau) \right] e^{-\epsilon_i \tau}, \quad n_i = \frac{1}{e^{\beta \epsilon_i} - 1}, \quad (2.87)$$

otrzymujemy splot w postaci (dla górnego grafu):

$$\delta_{ij}\delta_{i'j'}[n_i+1][n_{i'}+1]\frac{e^{-\beta\epsilon_i}e^{-\beta\epsilon'_i}-1}{i\omega_\nu-\epsilon_i-\epsilon_{i'}} = -\delta_{ij}\delta_{i'j'}\frac{1+n_i+n_{i'}}{i\omega_\nu-\epsilon_i-\epsilon_{i'}} \xrightarrow{T\to 0} -\frac{\delta_{ij}\delta_{i'j'}}{i\omega_\nu-\epsilon_i-\epsilon_{i'}}, \quad (2.88)$$



Rysunek 2.7. Wkład do operatora masowego od wierzchołków trójkątnych w najniższym rzędzie (linia ciągła — FGM ekscytonu, linia przerywana — FGM fononu)



Rysunek 2.8. Wkład do operatora masowego ekscytonu prowadzący do czystego defazowania spinu w stanie n ekscytonu (linie ciągłe — FGM ekscytonu, linie przerywane — FGM magnonów)

(dla dolnego grafu)

$$\delta_{ij}\delta_{i'j'}[n_{i'}+1]n_i\frac{e^{-\beta\epsilon_{i'}}e^{\beta\epsilon_i}-1}{i\omega_{\nu}-\epsilon_{i'}+\epsilon_i} = \delta_{ij}\delta_{i'j'}\frac{n_{i'}-n_i}{i\omega_{\nu}-\epsilon_{i'}+\epsilon_i} \xrightarrow{T\to 0} 0,$$
(2.89)

zauważmy, że dla bozonów  $e^{i\beta\omega_{\nu}} = e^{i\pi^{2}\nu} = 1$  oraz  $n_i + 1 = n_i e^{\beta\epsilon_i}, n_i \to 0$  dla  $T \to 0$   $(n_i e^{\beta\epsilon_i} \to 1, (n_i + 1)e^{-\beta\epsilon_i} \to 0^6, v(k_1, k_2; k_3) = v^*(k_3, k_2; k_1)$ . Dolny graf nie wnosi zatem wkładu dla  $T \to 0$ .

 $6 n_i(x) = \frac{1}{e^{x/kT}-1} \simeq kT/x$ , co dla małych x prowadziłoby do osobliwości w x = 0 (typu kondensacja Bosego–Einsteina) — dlatego przy braku takiej kondensacji należy rozbieżność tę odrzucić i przyjąć niewielkie przesunięcie energetyczne (szczelinę lub potencjał chemiczny)  $x \leftrightarrow x + |\mu|$ .

Podany przykład można uogólnić do prostej reguły obliczania wkładów do operatora masowego dla dowolnych wielokątnych wierzchołków:

— Jeśli wewnętrzna funkcja Greena, goła lub pełna (wtedy ze zrenormalizawaną energią przez rzeczywistą część operatora masowego dla samouzgodnionych równań) ma zwrot zgodny z kierunkiem grafu (z lewa na prawo), to wnosi czynnik  $[n_i + 1]$  i energię z minusem w eksponencie i w mianowniku wyrażenia  $\frac{e^{-\beta\epsilon_i}\dots -1}{i\omega_{\nu}-\epsilon_i\dots}$ ,

— Jeśli wewnętrzna funkcja Greena, goła lub pełna (wtedy ze zrenormalizowaną energią przez rzeczywistą część operatora masowego dla samouzgodnionych równań) ma zwrot przeciwny do kierunku grafu (z prawa na lewo), to wnosi czynnik  $[n_i]$  i energię z plusem w eksponencie i w mianowniku wyrażenia  $\frac{e^{\beta\epsilon_i}...-1}{i\omega_\nu + \epsilon_i...}$ 

Sformułowana reguła pozwala na znajdowanie wkładów do operatora masowego dla wielokątnych wierzchołków, w szczególności dla kwadratowego wierzchołka (jedynego mogącego prowadzić do czystego defazowania ekscytonu przez fale spinowe w DMS — zgodnie z poprzednim rozdziałem). Graf diagonalny w stanach ekscytonowych, w szczególności w stanie podstawowym (rys. 2.8), daje zatem wkład:

$$\sum_{k_1,k_2} |V(k_1,k_3=n;n,k_2)|^2 [1+n_1] [1+n_3] n_2 \frac{e^{-\beta\epsilon_1} e^{-\beta\epsilon_3} e^{\beta\epsilon_2} - 1}{i\omega_\nu - \epsilon_1 - \epsilon_3 + \epsilon_2}$$
$$= -\sum_{k_1,k_2} |V(k_1,k_3=n;n,k_2)|^2 \frac{[1+n_1] n_2}{i\omega_\nu - \epsilon_1 - \epsilon_3 + \epsilon_2}.$$
 (2.90)

Ostatnia równość przy założeniu  $n_3 = 0$ ; dolna linia — ekscytonowa — (skierowana zgodnie z kierunkiem grafu) daje wkład  $[1 + n_3]$ , ale z  $n_3 = 0$ , lub (przeciwnie skierowana do kierunku grafu) daje wkład  $n_3$ , z  $n_3 = 0$ , co odpowiada przyjętemu modelowi próżni ekscytonowej (czyli T = 0 dla ekscytonów, mimo że równocześnie może być  $T \neq 0$  dla magnonów) [39]. 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.

#### 2.4.2. Urojona część operatora masowego

Przedstawiony sposób obliczania wkładów do operatora masowego jest istotny dla określenia jego urojonej części, która ma bezpośredni wpływ na intensywność spektralną i jej odwrotną transformatę Fouriera — funkcję korelacyjną. Postać wkładu do operatora masowego, która może wiązać się z czystym defazowaniem (tj. odpowiada wierzchołkowi diagonalnemu w stanach ekscytonowych) jest następująca

$$\sim \sum |V|^2 [1+n_j] n_i \cdots \frac{e^{\beta \epsilon_i} e^{-\beta \epsilon_j} \dots -1}{i\omega_{\nu} + \epsilon_i - \epsilon_j \dots}.$$

W tym składniku operatora masowego można teraz dokonać przedłużenia analitycznego, związanego z przejściem od matsubarowskich składowych fourierowskich do transformaty funkcji retardowanej (adwansowanej) [15,16]. Uzyskujemy zatem wyrażenie

$$\sim \sum |V|^2 [1+n_j] n_i \cdots \frac{e^{\beta \epsilon_i} e^{-\beta \epsilon_j} \dots -1}{E+\epsilon_i-\epsilon_j \dots}, \ E=\omega+i\Gamma,$$

gdzie korzystając ze związku

$$\frac{1}{x+i\Gamma} = P\frac{1}{x} - i\pi\delta(x),$$

otrzymujemy urojoną część wkładu do operatora masowego:

$$-\pi \sum |V|^2 [1+n_j] n_i \cdots \left( e^{\beta \epsilon_i} e^{-\beta \epsilon_j} \dots - 1 \right) \delta(\omega + \epsilon_i - \epsilon_j \dots).$$

W przypadku oddziaływania ładunkowych stopni swobody ekscytonu w kropce z fononami LA i LO uzyskujemy w ten sposób wyrażenia na odpowiednie wkłady do urojonej części operatora masowego ekscytonu, w postaci przedstawionej równaniami w części pierwszej (równania (1.9), (1.10)). Dla oddziaływania spinowych stopni swobody ekscytonu w kropce z falami spinowymi w DMS urojona część operatora masowego (związana z grafem przedstawionym na rys. (2.8) i prowadząca do czystego defazowania) ma postać:

$$\gamma_n(\omega, T) = \pi \sum_{i,j=1}^2 \sum_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2} |V(n, \mathbf{k}_1, i; n, \mathbf{k}_2, j)|^2 \times [n_i(\mathbf{k}_1) + 1] n_j(\mathbf{k}_2) \delta(\omega - E_n - \varepsilon_i(\mathbf{k}_1) + \varepsilon_j(\mathbf{k}_2)), \quad (2.91)$$

dla stanu podstawowego ekscytonu n = 0, oddziaływanie

$$V(n, \mathbf{k}_{1}, i; n, \mathbf{k}_{2}, j)|_{n=0} = \beta_{0} 2Sx \begin{bmatrix} v_{\mathbf{k}_{2}} v_{\mathbf{k}_{1}}, & v_{\mathbf{k}_{2}} u_{\mathbf{k}_{1}} \\ u_{\mathbf{k}_{2}} v_{\mathbf{k}_{1}}, & u_{\mathbf{k}_{2}} u_{\mathbf{k}_{1}} \end{bmatrix} \\ \left( F_{00}^{e}(\mathbf{k}_{1} - \mathbf{k}_{2}) - F_{00}^{h}(\mathbf{k}_{1} - \mathbf{k}_{2}) \right),$$

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

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

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

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

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

Dane materiałowe, a także stałe  $\tilde{A}_{e(h)}(0)$  dla kropki w materiale DMS — Zn(Mn)Se/ CdSe podano w tab. 2.1. Po uwzględnienu podanych zależności otrzymujemy:

$$\gamma_{0}(\omega, T) = \pi \sum_{\mathbf{k}_{1}, \mathbf{k}_{2}} |V(\mathbf{k}_{1} - \mathbf{k}_{2}, 0)|^{2} \\ \times \left\{ [n_{1}(\mathbf{k}_{1}) + 1]n_{1}(\mathbf{k}_{2})v_{\mathbf{k}_{2}}^{2}v_{\mathbf{k}_{1}}^{2}\delta(\omega - E_{0} - \varepsilon_{1}(\mathbf{k}_{1}) + \varepsilon_{1}(\mathbf{k}_{2})) \\ + [n_{1}(\mathbf{k}_{1}) + 1]n_{2}(\mathbf{k}_{2})v_{\mathbf{k}_{2}}^{2}u_{\mathbf{k}_{1}}^{2}\delta(\omega - E_{0} - \varepsilon_{1}(\mathbf{k}_{1}) + \varepsilon_{2}(\mathbf{k}_{2})) \\ + [n_{2}(\mathbf{k}_{1}) + 1]n_{1}(\mathbf{k}_{2})u_{\mathbf{k}_{2}}^{2}v_{\mathbf{k}_{1}}^{2}\delta(\omega - E_{0} - \varepsilon_{2}(\mathbf{k}_{1}) + \varepsilon_{1}(\mathbf{k}_{2})) \\ + [n_{2}(\mathbf{k}_{1}) + 1]n_{2}(\mathbf{k}_{2})u_{\mathbf{k}_{2}}^{2}u_{\mathbf{k}_{1}}^{2}\delta(\omega - E_{0} - \varepsilon_{2}(\mathbf{k}_{1}) + \varepsilon_{2}(\mathbf{k}_{2})) \right\},$$

$$(2.92)$$

 $\varepsilon_1(\mathbf{k}) = Dk^2, \ \varepsilon_2(\mathbf{k}) = D_0 - Dk^2, V(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2, 0) = \beta_0 2Sx(F_{00}^e(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) - F_{00}^h(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)) = f(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2 = \mathbf{k}) = A \frac{e^{-\alpha k^2}}{[1+\beta k^2]^2}, A = \beta_0 2Sx(\tilde{A}_e(0) - \tilde{A}_h(0)), \beta = l_{ex}^2/4, \alpha = l^2/2,$ gdzie l — rozmiar ekscytonu w stanie podstawowym w kropce uśredniony po kierunkach jest rzędu rozmiaru kropki,  $l_{ex}$  — to zasięg oddziaływania wymiennego, lub:

$$\gamma_{0}(x,T) = \pi A^{2} \sum_{\mathbf{k}_{1},\mathbf{k}_{2}} \frac{e^{-2\alpha(k_{1}-k_{2})^{2}}}{[1+\beta(k_{1}-k_{2})^{2}]^{4}} \\ \times \left\{ [n_{1}(k_{1})+1]n_{1}(k_{2})v_{k_{2}}^{2}v_{k_{1}}^{2}\delta(x-D(k_{1}^{2}-k_{2}^{2})) + [n_{1}(k_{1})+1]n_{2}(k_{2})v_{k_{2}}^{2}u_{k_{1}}^{2}\delta(x+D_{0}-D(k_{1}^{2}+k_{2}^{2})) + [n_{2}(k_{1})+1]n_{1}(k_{2})u_{k_{2}}^{2}v_{k_{1}}^{2}\delta(x-D_{0}+D(k_{1}^{2}+k_{2}^{2})) + [n_{2}(k_{1})+1]n_{2}(k_{2})u_{k_{2}}^{2}u_{k_{1}}^{2}\delta(x-D(k_{2}^{2}-k_{1}^{2})) \right\},$$

$$(2.93)$$

 $\begin{aligned} x &= \omega - E_0, \, n_1(k) = \frac{1}{e^{Dk^2/kT} - 1}, \, n_2(k) = \frac{1}{e^{(D_0 - Dk^2)/kT} - 1} \, \text{i dla malych } k \, (k/k_{\text{max}} << 1), \, k_{\text{max}} &= \pi/a), \, u_k^2 = \frac{x_p}{x_p + 2Sx} - Bk^2, \, v_k^2 = \frac{2Sx}{x_p + 2Sx} + Bk^2, \, B = \frac{x_p}{x} \frac{2S - x_p/x}{(2S + x_p/x)^3} 2Sl_{ex}^2, \end{aligned}$ 

90



Rysunek 2.9. 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 (2.93) — A i B (dla stosunku czasów 1:4), dla drugiego (trzeciego) składnika we wzorze (2.93) — C (wkład mniejszy o rząd wielkości)

 $D_0 = -\tilde{\mathcal{A}}_p(0)(x_p + 2Sx), D = -\tilde{\mathcal{A}}_p(0)\frac{2Sx_px}{x_p + 2Sx}l_{ex}^2$ , gdzie  $\tilde{\mathcal{A}}_p(0)$  jest oddziaływaniem wymiennym domieszki z dziurą pasmową, oraz przyjmujemy  $\tilde{\mathcal{A}}_h(0) = \tilde{\mathcal{A}}_p(0)$ , pamietając, że dla kropki oddziaływanie wymienne było renormalizowane dodatkowo przez czynnik  $\beta_0$ .

# 2.4.3. Różnica pomiędzy defazowaniem ekscytonu w kropce kwantowej przez magnony i fonony

Ze względu na innego typu wierzchołek oddziaływania prowadzący do czystego defazowania: ekscyton-fonony (trójkątny) i ekscyton-magnony (czworokątny) występuje istotna różnica obu tych zjawisk. Zachowanie spinu w wierzchołku (w czasie oddziaływania) wymaga 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 emisja magnonu musi być stowarzyszona z absorpcją innego (by zrównoważyć utracony na wierzchołku spin w wyniku emisji fali spinowej — równanie (2.91)). Jeśli 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 i dąży do zera 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). Można



Rysunek 2.10. Wkład do operatora masowego ekscytonu w najniższym rzędzie względem oddziaływania z magnonami bez zmiany stanu ekscytonu (graf ten nie wnosi części urojonej)

dodać, że w przypadku magnonów dla  $k \to 0$ , z powodu szczeliny magnonowej,  $n_2 \ll n_1$ i wkład w niskich temperaturach dają człony z czynnikami  $n_1(1 + n_1)$ .

W wyższych temperaturach, kiedy liczba termodynamicznych magnonów (które mogą być absorbowane) dostatecznie wzrośnie, defazowanie spinu przez magnony jest równie efektywne jak defazowanie ładunków przez fonony. Opisana różnica obu efektów podkreśla jednak wiekszą 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).

#### 2.4.4. Rzeczywista poprawka do operatora masowego

Graf przedstawiony na rys. 2.8 prowadzi do urojonej części operatora masowego (2.91), ale także ma część rzeczywistą, która wnosi poprawkę do energii ekscytonu. Poprawka ta jest drugiego rzędu względem oddziaływania V i jest mniejsza od poprawki pierwszego rzędu w oddziaływaniu odpowiadającej grafowi na rys. 2.10 (graf ten nie wnosi części urojonej).

Górna pętla (rys. 2.10) wnosi wkład do operatora masowego zgodnie z regułą [15]:

$$\lim_{\tau' \to \tau, \ \tau' > \tau} \mathcal{G}_{\hat{\alpha}_p \hat{\alpha}_q^+}(\tau, \tau') = <<\hat{\alpha}_q^+ \hat{\alpha}_p >> \quad (\sim \delta_{pq})$$
(2.94)

i po sumowaniu względem  $(\mathbf{k}, i)$  wyraża się przez funkcje rozkładu magnonów — czyli przez magnetyzację wywołaną przez magnony, co było obliczone w jednym z poprzednich paragrafów.

# 2.5. Model bramki kwantowej singlet-tryplet na kropkach typu He

W celu unikniecia ograniczeń czasowych, związanych ze spinowymi qubitami na kropkach kwantowych, rozważać można zastosowanie stanów singlet i tryplet do implementacji spinowego qubitu, zamiast pojedynczego spinu. Taki minimalny kolektywny qubit wydaje sie być odporniejszy na dekoherencje, zwłaszcza że dla jednorodnego pola magnetycznego element przejścia miedzy jego stanami jest zerowy (przejście singlet-tryplet wywołuje wyłacznie pole niejednorodne). Taka koncepcja została wprowadzona w pracy [50], przy wykorzystaniu dwuelektronowych kropek kwantowych typu He. Projekt takiej konstrukcji kwantowej nabiera ostatnio znaczenia wobec pojawienia się technologii wytwarzania kropek magnetycznych, tj. kropek kwantowych w półmagnetycznym półprzewodniku DMS. W takim materiale następuje silny wzrost efektywnego czynnika giromagnetycznego w członie Pauliego (w fazie uporzadkowanej), co istotnie zwiększa rozszczepienie stanów trypletowych i pozwala na bardziej precyzyjną definicję qubitu przy wykorzystaniu tylko najniższego z tych stanów (bardziej odsuniętego od pozostałych w polu Weissa). Wpływ pola Weissa na operacje jednoqubitowe dla qubitu rozpiętego na stanach singlet i tryplet nie jest istotny, gdyż niezerowy element przejścia między stanami singletowym i trypletowym pary elektronów daje tylko niejednorodne pole (magnetyzacja w fazie uporządkowanej DMS jest jednorodna). Pole Weissa mogłoby przyspieszać operacje jednoqubitowe na jednospinowych qubitach, ponieważ element macierzowy przejścia między stanami |1/2, 1/2 > i |1/2, -1/2 > jest niezerowy dla jednorodnego pola magnetycznego. Ale dla realizacji oscylacji Rabiego potrzebne jest pole dynamiczne (Dodatek B) (dwie orientacje spinu w niezerowym polu są niezdegenerowane), co znowu stoi na przeszkodzie wykorzystaniu pola Weissa do ciągłej regulacji stanu (oscylacji Rabiego) nawet dla jednospinowych qubitów. Dodatkowo, opisana wyżej niekorzystna dekoherencja fazowa (a także amplitudowa) wywołana przez fale spinowe w fazie uporządkowanej wydaje się ogranicząć przydatność tych materiałów do konstrukcji skalowalnych spinowych bramek logicznych (z korekta błędów, która wymaga spełnienia kryteriów DiVincenzo), chociaż możliwość wyłączenia czystego defazowania spinu w T = 0 (i znacznej jego redukcji w niskich temperaturach) wskazuje na pewne przewagi spinów o praktycznym znaczeniu.

Idea qubitu i bramki na stanach singletowym i trypletowym w kropkach typu He jest następująca [38]: W kropce typu He para elektronów może znajdować się w stanie singletowym o antysymetrycznej strukturze spinowej  $\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow \rangle |\downarrow \rangle |\downarrow \rangle |\uparrow \rangle$ ), lub w jednym z 3 stanów symetrycznych trypletu:  $|\uparrow \rangle |\uparrow \rangle$ ,  $|\downarrow \rangle |\downarrow \rangle, \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow \rangle |\downarrow \rangle + |\downarrow \rangle |\uparrow \rangle$ ). Qubit w kropce typu He rozpiąć moż-



Rysunek 2.11. Model bramki kwantowej na parze kropek kwantowych typu He (lewy); qubit w kropce He rozpięty na stanach: siglet  $|0,0\rangle$  i dolny stan trypletowy  $|1,-1\rangle$ , których odległość energetyczna może być regulowana polem sterującym (prawy)

na na stanie singletowym i najniższym energetycznie (w polu magnetycznym) stanie trypletowym  $|\uparrow\rangle > |\uparrow\rangle$  (bez pola magnetycznego degeneracja stanów trypletowych stoi na przeszkodzie poprawnej definicji qubitu, co prowadzić może do wypływu informacji kwantowej). W półprzewodniku półmagnetycznym DMS, w fazie uporządkowanej magnetycznie, pojawia się dodatkowo bardzo silne wewnętrzne pole Wiessa (działające paramagnetycznie — tj. wzmacniające człon Pauliego), które silnie rozszczepia stany trypletowe (nawet bez zewnętrznego pola) i pozwala na poprawną definicję qubitu (rys. 2.11).

#### Oscylacje Rabiego w punkcie degeneracji singlet-tryplet

Konfiguracja qubitu singlet-tryplet w kropce dwuelektronowej stwarza korzystną możliwość regulacji odległości energetycznej między dwoma jego stanami. Singlet jest stanem podstawowym bez obecności pola magnetycznego, jednakże wraz ze wzrostem pola (łamiącego symetrię na odbicie czasu) stan trypletowy jest coraz bardziej faworyzowany energetycznie [49], aż przy pewnej krytycznej wartości pola magnetycznego oba poziomy przecinają się i dla wyższych pól trypletowy stan ma mniejszą energię niż singletowy [49]. Pole krytyczne zależy od rozmiarów kropki i można określić je przybliżonym wzorem [50]:

$$B^*[T] \simeq \hbar \omega_0 [\text{meV}]/1,6$$

zatem dla płytkich i rozległych kropek, pole to może być rzędu 1T, co znajduje się w zasięgu łatwo osiągalnym technicznie.

Oscylacje Rabiego to metoda sterowania qubitem (Dodatek B). Dla układu dwupoziomowego (qubitu) i zaburzenia dynamicznego ~  $Ve^{i\omega t}$  rozwiązanie na ewolucję niestacjonarnego stanu sprowadza się do oscylacji qubitu między swoimi dwoma stanami z częstością ~ |V|, przy warunku rezonansowego dopasowania zaburzenia  $\hbar\omega = \Delta E$  ( $\Delta E$  to odległość energetyczna dwóch stanów stacjonarnych



Rysunek 2.12. Oscylacje Rabiego (koła na sferze Blocha — lewy) dla rezonansu i niepełnego rezonansu

niezaburzonego qubitu) następuje cykliczny przepływ energii między układem dwupoziomowym i sygnałem. W wyniku oscylacji Rabiego zmienia się w czasie koherentna superpozycja obu stanów qubitu i poprzez wyłączenie sygnału zaburzającego w odpowiednim momencie można uzyskać dowolną pożądaną superpozycję — dowolny stan qubitu. Gdy częstość sygnału nie jest dopasowana rezonansowo  $\hbar \omega \neq \Delta E$ , wówczas oscylacje Rabiego są niepełne (nie osiągają 1) — jak można to zilustrować na rys. 2.12.

W przypadku zmniejszania  $\Delta E \rightarrow 0$  (jak w punkcie degeneracji dla qubitu siglet–tryplet — rys. 2.11) oscylacje Rabiego dalej będą zachodzić, nawet w punkcie degeneracji, ale wtedy dla zaburzenia *statycznego* — z rachunku zaburzeń niezależnych od czasu — otrzymujemy w takim przypadku [27, 38, 50] zależny od czasu stan koherentny qubitu i podobnie jak poprzednio, poprzez wyłączenie zaburzenia, albo poprzez wyjście z punktu degeneracji (wtedy pole statyczne nie wywołuje już oscylacji Rabiego) uzyskać można dowolną superpozycję qubitu. Dla qubitu singlet–tryplet w punkcie degeneracji do oscylacji Rabiego prowadzi niejednorodne statyczne pole magnetyczne (niejednorodność pola magnetycznego konieczna jest dla uzyskania niezerowego elementu macierzowego między singletem i trypletem). Sterowanie takim qubitem polegać może zatem na stałej obecności niejedorodnego w skali nanometrowej pola magnetycznego pochodzącego np. od domieszek magnetycznych w bezpośrednim sąsiedztwie kropki He (lub nawet w jej wnętrzu) — i na wprowadzaniu i wyprowadzaniu przez sterujące zewnętrzne pole magnetyczne do i z punktu degeneracji singlet–tryplet.

### Sterowanie splątaniem pary qubitów

Oddziaływanie (kulombowskie) dwóch qubitów typu He jest obecne w pewnej bezwzględnej wielkości dla dwóch kropek blisko położonych (w praktyce realizuje się pary kropek w układzie wertykalnym oddzielone odległością kilku nm) [5,38].

O tym jednak, czy to oddziaływanie jest małe, czy duże — tj. czy prowadzi do wolnych, czy szybkich operacji dwuqubitowych — decyduje bezwymiarowy stosunek tego oddziaływania i drugiej skali energetycznej układu: odległości energetycznej stanów stacjonarnych rozpinających qubit. W przypadku qubitów singlet-tryplet mamy możliwość zmiany tej odległości energetycznej w szerokim zakresie przy pomocy zewnętrznego pola magnetycznego — odległość energetyczna stanów singlet i tryplet w kropce He zależy od pola magnetycznego i zmienia się w zakresie kilkudziesięciu meV do zera. Bez trudu zatem można uczynić *względne* kulombowskie oddziaływanie dwóch qubitów, małym lub dużym i w ten sposób spowolnić (praktycznie zatrzymać) lub silnie przyspieszyć operacje dwuqubitowe.

Choć taki schemat wydaje się mieć wiele atrakcyjnych cech (m.in. także dodatkowe możliwości sterowania makroskopowo temperaturą i koncentracją dziur w półprzewodniku półmagnetycznym i kontrolowania w ten sposób przejścia magnetycznego w tym podukładzie), to jednak należy podkreślić, że dodatkowy układ magnetyczny wprowadza fale spinowe i opisany mechanizm dekoherencji spinu ubieranego w mody kolektywne (fale spinowe) jest szkodliwy, podobnie do szkodliwych efektów fononowych dla ładunków. Defazowanie spinów w kropkach w wyniku hybrydyzacji z magnonami jest jednak mało istotne w niskich temperaturach (jak wykazano wyżej), co ponownie wskazuje na przewagę spinowych stopni swobody nad ładunkowymi.

# Podsumowanie i wnioski

Możliwość zbudowania bramki logicznej dla komputera kwantowego w technologii kropek kwantowych stała się w ostatnich latach wiodącym motywem wielu projektów badawczych realizowanych w skali międzynarodowej. Kropki kwantowe (zwane też sztucznymi atomami) i ich układy (sztuczne molekuły lub matryce kropek) stwarzają wiele możliwości badawczych związanych z dużą elastycznością ich parametrów, rozmaitością metod wytwarzania, możliwością wiązania elektronów, dziur, ekscytonów, czy kompleksów ekscytonowych w różnych wariantach, łatwością sterowania polami zewnętrznymi w dostępnym technicznie obszarze, możliwością realizacji dynamiki 3D i 2D (w zależności od geometrii kropek). Zarówno orbitalne (ładunkowe), jak i spinowe (magnetyczne) stopnie swobody nośników uwięzionych w kropkach kwantowych były teoretycznie rozważane jako potencjalne możliwości realizacji bitów kwantowych (qubitów).

Kropki kwantowe z uwagi na wykazywane własności wydawają się bardzo odpowiednie jako elementy budowy komputera kwantowego. Z jednej strony, kwantowanie dynamiki zlokalizowanych nośników prowadzi do własności typowych dla atomów i pozwala stosować metody optyki kwantowej. Z drugiej zaś strony, kropki kwantowe oferują korzystną energetyczną skalę kwantowania (związaną z nanometrową skalą lokalizacji), możliwość technologicznej realizacji zwielokrotniania układu i możliwość powiązania kwantowych elementów z typowymi półprzewodnikowymi strukturami scalonymi klasycznej informatyki (niezbędne układy wejścia/wyjścia). Mimo tych obiecujących własności, a także ogromnych wysiłków eksperymentalnych, realizacja kwantowego przetwarzania informacji w technologii kropek wciąż pozostaje na etapie bramki dwuqubitowej, działającej z małą wiernością w nieskalowalnej realizacji biekscytonowej. Ta silna rozbieżność pomiędzy oczekiwaniami i propozycjami teoretycznymi a postępem eksperymentu i technologii wskazuje na nieuwzględnienie pewnych istotnych czynników decydujących o możliwości koherentnego sterowania stanami kwantowymi w kropkach kwantowych.

W przedstawionej pracy podjęto próbę identyfikacji i opisania (zarówno jakościowo, jak i ilościowo) tego krytycznego czynnika. Wskazano, że pomimo pewnego podobieństwa pomiędzy kropkami kwantowymi a naturalnymi atomami analogia między tymi układami okazuje się powierzchowna. Kropki wbudowane są w krysz-

tał heterostruktury półprzewodnikowej i podlegają nieusuwalnym oddziaływaniom z siecia krystaliczna. Centralny wynik tych badań (zawarty jest w pracy [31]) polega na wykazaniu, że dynamiczna odpowiedź sieci (związana z ubieraniem zlokalizowanych w kropce kwantowej wzbudzeń, np. ekscytonu, w kolektywne mody fononowe otaczającego materiału) powoduje znacząca dekoherencje fazowa stanów ładunkowych w warunkach sterowania optycznego w czasie kilku pikosekund po szybkim optycznym przełączeniu stanu qubitu. Dekoherencja, powodując niekontrolowany wypływ informacji kwantowej, prowadzi do utraty kontroli nad jej nośnikiem (qubitem w kropce kwantowej). Oznacza to, że sterowanie qubitem możliwe jest jedynie w reżimie adiabatycznym, a wiec w skali czasu dłuższym od pikosekundy. Ta pikosekundowa skala czasu lokuje sie bardzo niekorzystnie pomiedzy skala czasu rzedu femtosekundy, najszybsza dla optycznych metod sterowania ładunkami w kropkach (i beda podstawa optymistycznych przewidywań co do możliwości implementacji bramek kwantowych), a nanosekundowym czasem życia ekscytonu. Taka relacja skali czasu prowadzi do błędów przynajmniej rzedu  $10^{-3}$  i wyklucza (zgodnie z tzw. kryteriami DiVincenzo) możliwość zastosowania kwantowej korekty błędów, a więc także skalowalnej implementacji kwantowego przetwarzania informacji w technologii kropek kwantowych.

Najważniejsze nowe wyniki przedstawione w części pracy dotyczącej fonowej dekoherencji to:

— podanie prostej i uniwersalnej metody oceny czasu defazowania w nano-strukturach,

— uzasadnienie tej metody na gruncie mikroskopowym w ramach formalizmu funkcji Greena (uwzględnienie roli pozabiegunowych charakterystyk funkcji Greena),

— wytłumaczenie silnego (do 400%) wzrostu sprzężenia ładunków z fonononami optycznymi w nanostrukturach (wzrost efektywnej stałej Fröhlicha),

— oszacowanie czasu defazowania ładunkowych stopni swobody w kropkach w wyniku tworzenia polaronów różnych typów — wprowadzenie pojęcia uogólnionego polaronu elektronowego i ekscytonowego zlokalizowanego w kropce,

 $-\!\!-$ czasowe ograniczenie spinowej blokady Pauliego w nanostrukturach w wyniku inercji sieci.

Ten ostatni rezultat wydaje się wykluczać możliwość realizacji pewnej klasy komputerów kwantowych, a mianowicie komputerów z konwersją qubitów *spin-charge* (szybkie przetwarzanie ładunkowe a przechowywanie informacji na odporniejszych na dekoherencję spinach), wobec wykazanego niekorzystnego ograniczenia czasowego na proces konwersji informacji kwantowej.

W pracy [25] podano kluczowy rezultat odnośnie do silnego wzmocnienia oddziaływania ładunkowych stopni swobody w nanostrukturach z sieciowymi fononami optycznymi (silne wzmocnienie efektywnej stałej Fröhlicha w kropkach kwantowych) — wyjaśnione zostały w ten sposób obserwacje eksperymentalne pochłania-

nia w dalekiej podczerwieni w kropkach kwantowych i anomalne wyniki pomiarowe tzw. współczynnika Huanga–Rhysa w kropkach.

Wyniki dotyczące defazowania otrzymane w ramach (wprowadzonego w pracy [31]) formalizmu zostały wykorzystane do opisania kinetyki tworzenia polaronów, lub ujmując to ogólniej, o opisania kinetyki niestacjonarnych zlokalizowanych stanów zhybrydyzowanych ze wzbudzeniami kolektywnymi otoczenia poprzez analizę pozadiagonalnych charakterystyk funkcji Greena. Analiza funkcji korelacyjnej (transformaty Fouriera intensywności spektralnej) doprowadziła do ogólnej uniwersalnej metody oceny czasu defazowania nośników zlokalizowanych w nanostrukturze, jako stosunku rozmiaru nanostruktury do prędkości grupowej wzbudzeń kolektywnych w otoczeniu (fononów lub magnonów), unoszących nadmiarową energię wiązania poza obszar nanostruktury. W zależności od dyspersji tych wzbudzeń czas dekoherencji skaluje się w różny sposób wraz z rozmiarem kropki (liniowo dla fononów LA, ale kwadratowo dla fononów LO i magnonów, które mają kwadratową dyspersję w pobliżu punktu  $\Gamma$ ).

Sformułowano także opis dekoherencji spinu w schemacie sterowania magnetycznego [62, 63] (w otoczeniu półprzewodnika półmagnetycznego z wykorzystaniem silnego wzrostu współczynnika giromagnetycznego w fazie uporządkowanej), uwzględniając istniejące przekonanie, że spinowe stopnie swobody są bardziej obiecujące i odporne jako potencjalne bity kwantowe. Zidentyfikowano jednak inne, niedostrzegane poprzednio, ograniczenia dekoherencyjne występujące w schematach sterownia spinem, tj. dekoherencję wywołaną przez fale spinowe — magnony [62,63]. Zaproponowano również model bramki kwantowej z wykorzystaniem stanów singlet i tryplet w kropkach typu He i oceniono jej defazowanie. Oryginalnym i ważnym wynikiem jest tu podanie nowej metody sterowania splątaniem poprzez regulowanie względnej roli oddziaływania (a nie samego oddziaływania) qubitów w stosunku do zmienianej (polem zewnętrznym) energetycznej separacji stanów qubitów, a także opisanie oscylacji Rabiego w punkcie degeneracji singlet–tryplet [38].

W odniesienu do defazowania spinu przez fale spinowe (magnony) zasadnicze rezultaty to:

— opisanie spinowej części układu półmagnetycznego półprzewodnika DMS, w tym:

- sformułowanie oryginalnej metody uśrednienia po losowych rozkładach domieszek w DMS i przeprowadzenie tego uśrednienia po losowych rozkładach magnetycznych domieszek i akceptorów — w celu odzyskania efektywnie translacyjnej niezmienniczości układu,
- scałkowanie fermionowych (dziurowych) stopni swobody układu, zarówno dla przypadku płytkich, jak i głębokich centrów akceptorowych,

FiXme: 2 są du wylkiczan jedna drugiej. J się wcina jak wygląda, j nie  zdiagonalizowanie efektywnego hamiltonianu spinowego DMS – znalezienie analitycznej postaci dyspersji fal spinowych w zależności od koncentracji domieszek magnetycznych i koncentracji pasmowych dziur pośredniczących oddziaływanie wymienne w DMS,

opisanie niskotemperaturowej termodynamiki DMS (magnetyzacja i ciepło właściwe DMS pochodzące od fal spinowych)

— zbadanie i opisanie roli nieporządku w DMS,

— podanie ogólnej fenomenologicznej metody oszacowania czasu: defazowania w wyniku hybrydyzacji lokalnych i kolektywnych spinowych stopni swobody,

— mikroskopowe uzasadnienie tej metody w przypadku magnonów w DMS:

- opisanie hamiltonianu oddziaływania spinu ekscytonu w kropce kwantowej i fal spinowych w DMS,
- znalezienie urojonej części operatora masowego ekscytonu odpowiedzialnej za defazowanie spinu w DMS,
- zbadanie różnicy defazowania ładunku ekscytonu przez fonony i jego spinu przez magnony,
- wykazanie znikania czystego defazowania spinu w nanostrukturach w T = 0 (w przeciwieństwie do defazowania ładunków przez fonony),

— zaproponowanie bramki spinowej (singlet–tryplet w kropkach He) i oryginalnego sposobu sterowania qubitem (oscylacje Rabiego w punkcie degeneracji), oraz nowego sposobu sterowania splątaniem qubitów w kropkach kwantowych zanurzonych w DMS.

Ważnym nowym jakościowym rezultatem [63] jest wykazanie, że dekoherencja spinów przez fale spinowe ma zmniejszającą się do zera amplitudę dla  $T \rightarrow 0$  i przez to nie jest tak istotna jak dekoherencja ładunków przez fonony (silna także w pobliżu T = 0 i w T = 0). Defazowanie spinu (choć słabe w niskich temperaturach) czasowo równie niekorzystnie lokuje się jednak ponownie pośrodku okna DiVincenzo (dla spinu przesuniętego o 3 rzędy wielkości w stronę dłuższych czasów w stosunku do przypadku ładunkowych stopni swobody).

Uzyskane wyniki rozstrzygają kwestię przydatności orbitalnych (czyli ładunkowych) stopni swobody w kropkach kwantowych dla budowy skalowanego komputera kwantowego sterowanego światłem w technologii stałociałowej. Pozwalają stwierdzić, że w technologii nanostruktur półprzewodnikowych nie można spełnić tzw. warunków DiVincenzo, koniecznych dla implementacji kwantowej korekty błędów, co z kolei jest niezbędne do konstrukcji dużego (skalowalnego 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 do wykorzystania niskotemperaturowej spintroniki do 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. koherentne źródła 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 istotnie różną od fizyki atomów, gdzie ze względu na odmienne relacje energetyczne wpływ otoczenia był nieznaczny.

Rezultaty dotyczące 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, wydaje się zatem mało realistyczna konstrukcja dużego komputera kwantowego w technologii ciałostałowej (a zwłaszcza na podstawie orbitalnych stopni swobody sterowanych światłem). Potrzebne są nowe idee teoretyczne — zostały one nakreślone i polegają na szukaniu topologicznych metod ominięcia dekoherencji poprzez wykorzystanie kolektywnych stanów nadprzewodzących lub poprzez wykorzystanie topologicznych — warkoczowych stopni swobody w układach hallowskich (nielokalne topologiczne lub kolektywne stopnie swobody wydają się być odporniejsze na dekoherencję, która ma lokalny charakter).

# Dodatek

# Elementy kwantowego przetwarzania informacji

# A. Porównanie informacji klasycznej i kwantowej

Każda informacja ma swój nośnik. Nośnikiem informacji klasycznej są makroskopowe układy fizyczne. Wielkości fizyczne charakteryzujące takie układy moga być wykorzystywane informatycznie — w wyniku ich klasycznego pomiaru można odzyskać wartość liczbowa (rzeczywistą) zapisanej w nich informacji. Pomiar klasyczny makroskopowego obiektu jest nieniszczacy i powtarzalny. Nie wyróżnia danego pomiaru, ani observatora, 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 i wpływy otoczenia (szumy/zaburzenia, w przypadku otwartych układów) [92]. Powtarzalność ta nadaje informacji klasycznej abstrakcyjny charakter, chociaż jest ona fizyczna w sensie swojego makroskopowego nośnika. Te makroskopowe wielkości fizyczne opisane są termodynamiką statystyczną — stąd wynika głęboki związek podstaw teorii informacji i fizyki statystycznej. W obu dziedzinach entropia odgrywa podstawową rolę (entropia Shannona [92] i II zasada termodynamiki), odzwierciedla ona bowiem zasadniczą cechę makroskopowych układów — ich chaotyzację, czyli 'zapominanie' o mikroskopowych warunkach początkowych (w wyniku nawet drobnych wpływów otoczenia) i manifestowanie średnich zachowań zgodnie z regułami prawdopodobieństwa.

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 pomiaru ani obserwatora),

— informacja klasyczna (fizyczne wielkości makroskopowych układów) spełnia reguły termodynamiki (w tym II zasadę termodynamiki i posługuje się pojęciem entropii). 104

Ale wszystkie układy makroskopowe mają atomową mikroskopowa budowę i w tej skali przejawia się nieklasyczny, kwantowy ich charakter (mimo że makroskopowo, przy złożoności  $\sim 10^{23}$  (tj. rzędu liczby Avogadra) zachowuja się klasycznie, tj. termodynamicznie — probabilistycznie). Informacja kwantowa to informacja zawarta w fizycznym nośniku kwantowym. Nie ma ona interpretacji klasycznej. Można przełożyć cześć informacji kwantowej na informacje klasyczna (liczby rzeczywiste) za pomocą pomiaru układu kwantowego (pomiar według von Neumanna), ale tylko niewielką część informacji kwantowej, liniową względem zasobów (liczby cząstek) – zgodnie z zasadami nieoznaczoności (mimo że zasoby kwantowe — wymiar przestrzeni Hilberta — rosną eksponencjalnie) [14]. Modelem matematycznym informacji kwantowej (czyli stanu kwantowego) jest funkcja falowa (dla zamknietych układów), lub macierz gestości (dla otwartych układów, oddziałujących z otoczeniem). Pomiar układu kwantowego jest niszczący i niepowtarzalny, wyróżnia konkretny pomiar i obserwatora, ponadto jest niedeterministyczny. Sama ewolucja zamknietego układu kwantowego jest deterministyczna (unitarna  $\rightarrow$  zachowuje wymiar przestrzeni Hilberta  $\rightarrow$  entropie  $\rightarrow$  informacje). Układ kwantowy otwarty nie podlega unitarnej ewolucji. Jeśli jest dostatecznie złożony (o liczbie cząstek rzędu liczby Avogadra) i otwarty, to jego ewolucja jest termodynamiczna i przejawia się klasycznie w postaci makroskopowych zachowań. Termodynamiczna ewolucja takich układów jest ponownie unitarna (zachowuje informację klasyczną — jest izoentropowa [9–13,91], ale tylko dla procesów odwracalnych; procesy rzeczywiste dla makroskopowych obiektów sa nieodwracalne, tj. odpowiadają wzrostowi entropii, czyli przebiegają w kierunku swoich bardziej prawdopodobnych stanów).

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.1. Informacja kwantowa i jej opis

#### 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 można go też powtórzyć. W przypadku układu kwantowego pomiar jest niszczący, tzn. nie może być powtórzony i w ten sposób sam pomiar wyróżnia obserwatora, który wykonuje ten pomiar. W klasycznej fizyce rola obserwatora nie była wyróżniona i dlatego pomiar odgrvwał drugoplanowa role i można było wprowadzić abstrakcyjne pojecie zmiennej losowej przyjmującej różne wartości (wyniki pomiaru; zawsze rzeczywiste liczby). W kwantowym przypadku pomiar jest najbardziej zasadniczym elementem uzyskiwania informacji. Przyjmując, że obserwatorem jest człowiek, to uzyskana informacja w wyniku pomiaru układu — nośnika informacji — musi być wyrażona przez liczbowa charakterystyke i to w sposób możliwy do rozróżnienia przez zmysły człowieka (np. za pośrednictwem 'wskazówki na skali'). Ten warunek powoduje, że różne (rozróżnialne dla człowieka) wyniki pomiarów wymagają zróżnicowania makroskopowej liczby stopni swobody (~ $10^{23})$ 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 splatanie układu mierzonego i przyrządu. Splatanie to spełnia warunki reprezentacji Schmidta [9], tzn. splatanie kwantowe może być tylko symetryczne.

#### Pomiar w mechanice kwantowej

W mechanice kwantowej wielkościom mierzalnym 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. Wartości własne danego operatora wyznaczają go jednoznacznie poprzez przedstawienie spektralne:

$$\hat{A} = \sum_{n} a_n \hat{P}_n,\tag{A.1}$$

gdzie  $a_n$  jest *n*-tą wartością własną (rzeczywistą, dla operatora hermitowskiego) operatora  $\hat{A}$ , natomiast  $\hat{P}_n$  jest operatorem rzutowania na podprzestrzeń własną odpowiadającą *n*-tej wartości własnej. Operator rzutowania spełnia własności hermitowskości i nilpotentności:

$$\hat{P}_n^+ = \hat{P}_n,\tag{A.2}$$

$$\hat{P}_n \hat{P}_m = \delta_{nm} \hat{P}_n. \tag{A.3}$$

Należy tu podkreślić, że twierdzenie spektralne jest słuszne zarówno dla operatorów ograniczonych, jak i nieograniczonych<sup>1</sup>, które występują w przestrzeniach nieskończonych (np. operator różniczkowania jest operatorem nieograniczonym, co pociąga za sobą też własność nieograniczoności dla operatorów pędu i energii kinetycznej). Dla nieograniczonych operatorów nie obowiązuje proste uogólnienie algebry liniowej (wektory własne moga nie tworzyć przeliczalnej bazy ON) [93].

#### Pomiar von Neumanna

Zgodnie z postulatem von Neumanna, w mechanice kwantowej przyjmujemy, że w wyniku pomiaru wielkości A (której operator ma spektralne przedstawienie (A.1)) dokonanym na stanie  $|\Psi\rangle$  uzyskuje się wynik  $a_n$  (jedna z wartości własnych operatora wielkości A) z prawdopodobieństwem  $p_n$ ,

$$p_n = ||\hat{P}_n|\Psi > ||^2 = \langle \Psi | \hat{P}_n^+ \hat{P}_n | \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{P}_n | \Psi \rangle, \tag{A.4}$$

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

$$\frac{\hat{P}_n|\Psi>}{<\Psi|\hat{P}_n|\Psi>^{1/2}}.$$
(A.5)

Wybór operatora rzutu jest zupełnie przypadkowy, określone jest tylko prawdopodobieństwo tego wyboru (A.4).

#### Równanie Schrödingera — ewolucja unitarna

Stan kwantowy  $|\Psi>$ układu zamkniętego zmienia się w czasie zgodnie z równaniem Schrödingera $i\hbar\frac{\partial|\Psi>}{\partial t}=\hat{H}|\Psi>$ , co zapisać można w postaci unitarnej ewolucji

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar} |\Psi(0)\rangle \tag{A.6}$$

 $(jeśli hamiltonian nie zależał jawnie od czasu)^2.$ 

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).

Jeżeli obserwator chce dowiedzieć się czegokolwiek o stanie tego układu, musi dokonać pomiaru jakiejś wielkości, ale wtedy następuje losowy kolaps (redukcja)

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup> Operator (nie)<br/>ograniczony to taki operator  $\hat{A}$ , dla którego (nie istnieje) istnieje stał<br/>aC, taka że  $||\hat{A}(x)|| \leq C||x||$  na kuli jednostkowej<br/>, $||x|| \leq 1$  (gdzie  $|| \dots ||$ — norma w przestrzeni Hilberta) [93].

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup> Dla hamiltonianu zależnego od czasu  $|\Psi(t+dt)\rangle = (1 + \frac{dt}{Bh}\hat{H})|\Psi(t)\rangle = \hat{U}|\Psi(t)\rangle, \hat{U}^{+}\hat{U} = \hat{U}\hat{U}^{+} = 1$ , z dokładnością do liniowego rzędu względem dt.

funkcji falowej do losowo wybranego wektora własnego (lub ogólniej, podprzestrzeni własnej) zgodnie z rzutowaniem von Neumanna. Kolaps ten gubi nieodwracalnie i zupełnie losowo informacje kwantowa — po pomiarze układ jest w którymś ze stanów własnych operatora mierzonej wielkości, zupełnie niezwiazanym z mierzonym stanem (wyjatek stanowi tu sytuacja, kiedy mierzony stan jest akurat 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  $p_n$ . Przypadkowość wyboru kierunku rzutowanie von Neumanna jest niedeterministycznym elementem kwantowej ewolucji. Należy tu podkreślić jednak, że w momencie pomiaru układ nie jest już zamkniety (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 zamkniety (odizolowany od otoczenia). Pomiar kwantowy (rzutowanie von Neumanna) silnie i w nieodwracalny (niedeterministyczny) sposób zaburza stan mierzonego układu, zupełnie inaczej niż w przypadku pomiaru klasvcznego, 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 wyniku pomiaru kwantowego (rzutowania von Neumanna) następuje przerwanie unitarnej ewolucji układu kwantowego. Po wykonaniu pomiaru i po wycofywaniu 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 (częściowo) 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.2. Macierz gęstości — stan informatyczny układu (qubitu)

Jeśli układ A jest w stanie czystym, to opis za pomocą funkcji falowej  $|\Psi\rangle$  odzwierciedla pełną informację kwantową zawartą w tym stanie, utożsamianą wtedy z tą funkcją falową. Gdy jednak układ oddziałuje z innym (zwykle właśnie tak jest w wyniku nieusuwalnego oddziaływania z otoczeniem), opis informacji kwantowej należy uogólnić. Wprowadza się tzw. macierz gęstości opisującą ogólnie

108

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 [9, 10, 27]:

$$\hat{\rho} = |\Psi\rangle < \Psi|, \ \hat{\rho} = \sum_{i,j} c_i^* c_j |j\rangle < i|, \ |\Psi\rangle = \sum_i c_i |i\rangle.$$
(A.7)

Wtedy dla dowolnej obserwabli M, jej wartość oczekiwana wyraża się jako:

$$<\hat{M}> = <\Psi|\hat{M}|\Psi> = Tr(\hat{\rho}\hat{M}). \tag{A.8}$$

# 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 A+B, który jako całość jest już w stanie czystym określonym w iloczynie tensorowym przestrzeni Hilberta obu układów:

$$|\Psi\rangle_{AB} \in \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B,\tag{A.9}$$

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

$$\hat{\rho}_{AB} = |\Psi\rangle_{AB} |_{AB} < \Psi|. \tag{A.10}$$

Jeśli w przestrzeniach Hilberta  $\mathcal{H}_A, \mathcal{H}_B$ , wybieramy bazy ON  $\{|i >_A\}, \{|r >_B\},$ to wtedy  $|\Psi >_{AB} = \sum_{i,r} a_{ir} |i >_A \otimes |r >_B$ , zgodnie z definicją iloczynu tensorowego obu przestrzeni. Z macierzy gęstości dla pełnego układu A+B (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 stanie mieszanym). Macierz gęstości układu A w stanie mieszanym wyrazi się wzorem:

$$\hat{\rho}_{A} = Tr_{B}(\hat{\rho}_{AB}) = \sum_{r} {}_{B} < r|\hat{\rho}_{AB}|r >_{B}$$

$$= \sum_{r,i,j,p,s} a_{ip}a_{js}^{*}{}_{B} < r|p >_{B} {}_{B} < s|r >_{B} |i >_{A} {}_{A} < j|$$

$$= \sum_{i,j,r} a_{ir}a_{jr}^{*}|i >_{A} {}_{A} < j|.$$
(A.11)
W przedstawionych formułach (A.7) i (A.11) różnica polega 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 ma trzy własności

- $\begin{array}{l} & \hat{\rho}^+ = \hat{\rho} \text{jest operatorem hermitowskim,} \\ & \forall_{|\Psi>} < \Psi | \hat{\rho} | \Psi > \geqslant 0 \text{jest nieujemnie określona,} \end{array}$
- $Tr(\hat{\rho}) = 1.$

Z własności hermitowskości macierzy gęstości wynika, że operator ten można zdiagonalizować przez odpowiedni wybór bazy 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, zatem suma wartości własnych jest równa 1.

Oznacza to, że w przestrzeni Hilberta układu A<br/>, $\mathcal{H}_A,$ istnieje taka baza  $\{|i>_A\},$ że

$$\hat{\rho}_A = \sum_i p_i |i\rangle_A \quad A < i|, \tag{A.12}$$

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, wówczas jego macierz gęstości ma postać  $\hat{\rho}_A = |\Psi\rangle_A |_A < \Psi|$ , 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)<sup>3</sup>.

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.12) 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 A+B jest w stanie czystym (zgodnie z założeniem). Należy podkreślić, że zmieszanie wynikło z oddziaływania układów A i B i oznacza ich kwantową korelację. Korelację tę nazywamy kwantowym splątaniem [9–13]. W szczególności można rozpatrywać najprostszy układ kwantowy — *qubit*, którego stan jest wektorem z dwuwymiarowej przestrzeni Hilberta. Stan mieszany

<sup>&</sup>lt;sup>3</sup> Operator 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  $\hat{\rho} = \sum_i p_i |i\rangle \langle i|$ ,  $Tr(\hat{\rho}^2) = \sum_i p_i^2 \langle \sum_i p_i = Tr(\hat{\rho})$ , czyli dla macierzy gęstości dla stanu mieszanego  $\hat{\rho}^2 \neq \hat{\rho}$ , zatem nie jest to operator rzutowania.

qubitu i jego stan czysty są zatem formami elementarnej informacji kwantowej, której nośnikiem jest ten qubit.

#### A.3. Reprezentacja Schmidta i stany splątane

Z własności hermitowskości dowolnej macierzy gęstości wynika, że możemy zawsze dla układu A, będącego częścią układu A+B, wybrać bazę w przestrzeni Hilberta  $\mathcal{H}_A$  taką, w której macierz gęstości układu A jest diagonalna, tj.

$$\hat{\rho}_A = \sum_i p_i |i|_{A-A} < i|.$$
(A.13)

Funkcję falową stanu czystego układu A+B, można zapisać, używając tej bazy w przestrzeni Hilberta układu A, tj.

$$|\Psi\rangle_{AB} = \sum_{i,r} a_{ir}|i\rangle_{A|} \otimes |r\rangle_{B} = \sum_{i} |i\rangle_{A} \otimes \left[\sum_{r} a_{ir}|r\rangle_{B}\right] = \sum_{i} |i\rangle_{A} \otimes |\tilde{i}\rangle_{B}.$$
(A.14)

Wektory  $|i\rangle_B$  nie tworzą bazy ON w  $\mathcal{H}_B$ , ale są ortogonalne (nie są unormowane), gdyż:

$$Tr_B(|\Psi \rangle_{AB \ AB} < \Psi|) = \sum_{r} B < r|\sum_{i} |i\rangle_A \otimes |\tilde{i}\rangle_B \sum_{j} A < j| \otimes \tilde{b} < j||r\rangle_B$$
$$= \sum_{i,j} \tilde{b} < j||\tilde{i}\rangle_B |i\rangle_A A < j| = \sum_{i} p_i|i\rangle_A A < i|$$
(A.15)

i stąd:  $\vec{a < j|i >_B} = \delta_{ij}p_i$ . Wektory  $|i >_B$  można unormować:

$$|i\rangle'_B = \frac{1}{\sqrt{p_i}} |\tilde{i}\rangle_B, \tag{A.16}$$

co ważne, tylko dla niezerowych  $p_i$  (liczba tych wektorów jest równa liczbie niezerowych wartości własnych macierzy gęstości  $\hat{\rho}_A = \sum_i p_i |i \rangle_A |a \langle i|$ ). Wektory te można następnie uzupełnić do pełnej bazy ON w  $\mathcal{H}_B$ .

Korzystając z wektorów  $|i\rangle'_B$ , funkcję falową stanu czystego układu A+B można zatem przedstawić w postaci (na podstawie (A.14)):

$$|\Psi\rangle_{AB} = \sum_{i} \sqrt{p_i} |i\rangle_A \otimes |i\rangle'_B \tag{A.17}$$

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 A+B).

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 obydwa układy *symetrycznie*. 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 reprezentacji (tj. ze wzoru (A.17) możemy zapisać macierz gęstości dla stanu mieszanego układu A w postaci diagonalnej

$$\hat{\rho}_A = Tr_B(|\Psi \rangle_{AB \ AB} < \Psi|) = \sum_i p_i |i \rangle_A \ A < i|,$$
(A.18)

ale i równocześnie, także w diagonalnej postaci, macierz gęstości dla układu B, tzn.

$$\hat{\rho}_B = Tr_A(|\Psi \rangle_{AB \ AB} < \Psi|) = \sum_i p_i |i\rangle'_B \ B < i|'.$$
(A.19)

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 wynikające z niej wnioski można odnieść do sposobu i jednoznaczności odtwarzania funkcji stanu splątanego na podstawie obu macierzy gęstości  $\hat{\rho}_A$  i  $\hat{\rho}_B$  [9–13].

#### 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 splątanym (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 tensorowego dwóch stanów czystych obu układów, a nie w postaci liniowej kombinacji takich iloczynów, jak ma to miejsce dla stanów splątanych).

Jak można dostrzec z podanych 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.4. Pomiar w sensie von Neumanna — superwybór Żurka

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. Umownie można tu mówić o zauważalnym wychyleniu makroskopowej wskazówki (ale też może to być np. wyświetlony, zauważalny i odróżnialny obraz na monitorze). W każdym przypadku możliwość makroskopowej identyfikacji wyniku wymaga zaangażowania makroskopowej liczby atomów (stopni swobody), rzędu liczby Avogadra ~  $10^{23}$ , nawet podczas pomiaru 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 Neumanna podał Żurek [94]. Schemat jego rozumowania jest następujący.

Rozpatrzmy obserwablę (wielkość mierzoną), której hermitowskim operatorem jest  $\hat{A}$  i załóżmy dla prostoty, że operator ten ma tylko dwa wektory własne: |1 > i |2 >, i odpowiadające im dwie wartości własne  $\lambda_1$  i  $\lambda_2$ . 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 > i |2 >. Dowolny stan czysty qubitu to koherentna superpozycja  $|\Psi\rangle = x|1\rangle + e^{i\psi}\sqrt{1-x^2}|2\rangle$ ,  $x, \psi \in R, x \in [0,1], \psi \in [0,2\pi)$ . Zgodnie ze schematem rzutowania von Neumanna, w wyniku pomiaru qubitu w stanie  $|\Psi\rangle$  wielkości A, z prawdopodobieństwem  $x^2$  otrzymujemy wynik  $\lambda_1$ i zamianę stanu  $|\Psi\rangle$  w stan  $|1\rangle$ , oraz z prawdopodobieństwem  $1-x^2$  otrzymujemy wynik  $\lambda_2$ , a stan  $|\Psi\rangle$  przechodzi w stan  $|2\rangle$ .

Dla stanu czystego  $|\Psi\rangle$  macierz gęstości ma postać (w zapisie macierzowym):

$$|\Psi> < \Psi| = \begin{pmatrix} x^2, & e^{-i\psi}x\sqrt{1-x^2} \\ e^{i\psi}x\sqrt{1-x^2}, & 1-x^2 \end{pmatrix},$$

Macierz ta jest hermitowska i ma ślad 1. Na diagonali macierzy gęstości stoją prawdopodobieństwa wyników pomiaru wielkości A. Pozadiagonalne elementy zawierają różnicę faz  $\psi$  współczynników superpozycji. Wyniki pomiaru wielkości A nie dają żadnej informacji o różnicy faz  $\psi$ . Pomiar niszczy tę część informacji (stanu kwantowego) zawartą w różnicy faz współczynników superpozycji. Można to zapisać macierzowo:

$$|\Psi\rangle < \Psi| = \begin{pmatrix} x^2, & e^{-i\psi}x\sqrt{1-x^2} \\ e^{i\psi}x\sqrt{1-x^2}, & 1-x^2 \end{pmatrix} \Longrightarrow \begin{pmatrix} x^2, & 0 \\ 0, & 1-x^2 \end{pmatrix},$$

gdzie  $\implies$  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 diagolnych macierzy gestości 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 Avogadra, gdyż wynik pomiaru ma być czytelny dla obserwatora, który rozumie tylko klasyczną informację. Taka informacja wymaga zmiany stopni swobody w liczbie rzędu liczby Avogadra.

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:

$$\hat{\rho} = Tr_P |\Omega_0 \rangle < \Omega_0 |$$

$$= \begin{pmatrix} x^2 < \Phi_0 | \Phi_0 \rangle, & x\sqrt{1 - x^2} e^{-i\psi} < \Phi_0 | \Phi_0 \rangle \\ x\sqrt{1 - x^2} e^{i\psi} < \Phi_0 | \Phi_0 \rangle, & (1 - x^2) < \Phi_0 | \Phi_0 \rangle \end{pmatrix},$$
(A.20)

gdzie całka <  $\Phi_0 | \Phi_0 >$  jest wynikiem wzięcia śladu po stanach przyrządu P:  $Tr_{P...} = \sum_{r} P < r|...|r >_P$ , gdzie { $|r >_P$ } jest bazą w przestrzeni Hilberta przyrządu ( $\sum_{r} |r >_P P < r| = 1$  — warunek zupełności bazy). Zatem

$$Tr_{P}(|\Phi >_{P} P < \Psi|) = \sum_{r} < r|\Phi > < \Psi|r > = <\Psi|\sum_{r} |r > < r|\Phi > = <\Psi|\Phi > .$$

Z warunku normowania $_P < \Psi | \Phi >_P = 1,$ 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  $|2\rangle$ , po pomiarze stan też pozostałby niezmieniony. W pierwszym przypadku stan przyrządu P po pomiarze byłby pewnym stanem z wczytaną informacją o wyniku pomiaru,  $\Phi_1$ , a w drugim przypadku  $\Phi_2$ . Można zatem napisać

$$|1\rangle \otimes |\Phi_0\rangle \Longrightarrow |1\rangle \otimes |\Phi_1\rangle, \quad |2\rangle \otimes |\Phi_0\rangle \Longrightarrow |2\rangle \otimes |\Phi_2\rangle.$$
 (A.21)

Jeśli pomiaru dokonujemy na superpozycji  $|\Psi\rangle = a_1|1\rangle + a_2|2\rangle$ , to pomiar przebiega według schematu:

$$|\Omega_0> = (a_1|1> + a_2|2>) \otimes |\Psi> \Longrightarrow a_1|1> \otimes |\Phi_1> + a_2|2> \otimes |\Phi_2> = |\Omega_1>.$$
(A.22)

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 splątanym). W tym splątanym stanie 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  $|\Omega_1 > < \Omega_1|$ . Biorąc ślad po stanach przyrządu, znaleźć można postać macierzy gęstości dla układu po pomiarze, czyli:

$$Tr_{P}(|\Omega_{1} > < \Omega_{1}|) = \begin{pmatrix} x^{2} < \Phi_{1} | \Phi_{1} >, & x\sqrt{(1-x^{2})}e^{-i\psi} < \Phi_{1} | \Phi_{2} > \\ x\sqrt{(1-x^{2})}e^{-i\psi} < \Phi_{2} | \Phi_{1} >, & (1-x^{2}) < \Phi_{2} | \Phi_{2} > \end{pmatrix}.$$
 (A.23)

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). Żurek argumentował [94,95], że całka ta jest całką wielokrotną, o krotności rzędu liczby Avogadra, 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 (zupelna dekoherencja fazowa).

Przytoczona argumentacja pozwala połączyć znikanie w wyniku pomiaru elementów pozadiagonalnych (czynników 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. Aby różne wyniki mogły być makroskopowo odróżnialne, to każdy wynik musi zostać zapisany w charakterystyczny sposób z użyciem 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, a zatem także w czasie pomiaru. Próbę odpowiedzi na tak postawione pytanie, kluczowe dla zrozumienia sposobu konwersji informacji kwantowej na klasyczną, zamieszczono w dalszej części.

#### Relatywistyczny charakter pomiaru kwantowego

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 proponujemy tu następujący scenariusz rzutowania von Neumanna. 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 soba fragmenty przyrzadu pomiarowego. Oddziaływanie miedzy 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 [94, 95]) w ramach nierelatywistycznej mechaniki kwantowej. W nierelatywistycznej mechanice kwantowej przyjmuje się natychmiastowe właczanie oddziaływania w całej przestrzeni, co nie jest jednak prawda — oddziaływania nie moga rozprzestrzeniać się szybciej niż predkość światła w próżni. Jednakże uogólnienie mechaniki kwantowej na relatywistyczny przypadek napotyka fundamentalne trudności (nie pokonane do tej pory). Zasadnicza trudność relatywistycznej mechaniki kwantowej polega na modyfikacji zasad nieoznaczoności [27],  $\Delta E \Delta t \sim \hbar$ , a stąd  $\frac{\partial E}{\partial p} \Delta p \Delta t \sim \hbar$ , ale  $\frac{\partial E}{\partial p} < c$ , zatem  $\Delta p \sim \frac{\hbar}{c\Delta t}$ , co oznacza, że nieokreśloność samego pedu jest ograniczona przez czas jego pomiaru; nie można zatem obserwować zmian pędu w czasie, a to wyklucza dynamike<sup>4</sup>.

Podobnie, z wymiarowej analizy wynika, że kombinacja stałych fundamentalnych o wymiarze długości ma postać:  $\frac{\hbar}{m_0c} = \Delta l$ . Wielkość tę można traktować jako nieoznaczoność położenia (niemożność pomiaru samego położenia wyklucza pojęcie funkcji falowej). Z drugiej części podanej równości wynika, że gdyby chcieć zmniejszyć  $\Delta l$ , przekroczyć można próg kreacji pary cząstka–antycząstka  $\Delta l = \frac{\hbar c}{m_0c^2}$ , co uniemożliwia realizację pomiaru położenia samej cząstki z większą dokładnością niż  $\Delta l$ .

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 [94, 95]).

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

 $<sup>^4\,</sup>$  Pęd jest dokładnie określony dla cząstek swobodnych (na podstawie translacyjnej niezmienniczości) — tylko takie cząstki mają sens w relatywistycznej mechanice kwantowej (wtedy pęd można mierzyć nieskończenie długo); można zatem określać stany swobodnych cząstek przed i po oddziaływaniu, ale nie w czasie oddziaływania.

pomiaru kwantowego mógłby się znacznie wydłużyć. Znane i standardowo obserwowane promieniowanie Czerenkowa [96,97], 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. Podobne zjawisko z falą dźwiękową występuje, gdy źródło dźwięku porusza się szybciej niż prędkość dźwięku w danym ośrodku. Wydaje się, że nie można dokonać pomiaru optycznego nadlatującego elektronu Czerenkowa, podobnie jak nie można usłyszeć pocisku nadlatującego z prędkości większą od prędkości dźwięku.

# A.5. Geometryczne własności macierzy gęstości — informacji kwantowej

Zbiór macierzy gęstości danego układu kwantowego jest zbiorem wypukłym (wypukła kombinacja liniowa dwóch macierzy gęstości:  $\hat{\rho}_1$  i  $\hat{\rho}_1$ ,  $\hat{\rho} = \lambda \hat{\rho}_1 + (1-\lambda)\hat{\rho}_2$ ,  $\lambda \in R$ ,  $\lambda \in [0,1]$ , jest też macierzą gęstości, tzn. jest operatorem hermitowskim, nieujemnie określonym i o śladzie równym 1). Dowodzi to, że zbiór macierzy gęstości jest zbiorem wypukłym w zbiorze wszystkich operatorów liniowych (co oznacza, że 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 dodatnimi i ujemnymi wartościami własnymi i wobec własności nieujemności macierzy gęstości, muszą leżeć także na granicy zbioru macierzy gęstości. Jeśli wszystkie, z wyjątkiem jednej wartości własnej macierzy gęstości są równe zeru — to 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. Jest to rozumiałe, gdyż 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:

$$|\Psi\rangle < \Psi| = \lambda \hat{\rho}_1 + (1-\lambda)\hat{\rho}_2.$$

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 qubitu) wszystkie stany brzegowe są ekstremalne (wynika to z faktu, że tylko jedna wartość własna może wynosić zero w przypadku macierzy  $2 \times 2$ ). 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.

Przedstawienie stanu mieszanego jako wypukłej kombinacji dwóch innych macierzy gęstości nie jest jednoznaczne. Mimo tej niejednoznaczności, dla dowolnej obserwabli $\hat{M}$ 

$$Tr(\hat{\rho}\hat{M}) = \lambda Tr(\hat{\rho}_1\hat{M}) + (1-\lambda)Tr(\hat{\rho}_2\hat{M})$$

i wynik nie zależy od wypukłego przedstawienia. Dla stanów mieszanych mamy zatem wiele możliwych rozkładów macierzy gęstości, których jednak nie możemy zidentyfikować pomiarami. Stan czysty, jako punkt ekstremalny, nie dopuszcza jednak żadnych wypukłych rozkładów tego stanu. Ta ukryta niejednoznaczność (niedostępna dla pomiarów), charakterystyczna dla stanów mieszanych, jest kolejną istotną cechą kwantowej informacji zawartej w stanach mieszanych danego układu. Podobnie jak splątanie, nie ma ona klasycznego odpowiednika.

# A.6. Geometria qubitu — zbiór wypukły macierzy gęstości qubitu (sfera Blocha)

Opisane wyżej geometryczne własności informacji kwantowej najłatwiej zilustrować na przykładzie qubitu. Macierze gęstości qubitu są więc zespolonymi macierzami  $2 \times 2$ . Nałożenie warunku hermitowskości powoduje ograniczenie rzeczywistych parametrów takiej macierzy do czterech. Można dowolną macierz hermitowską  $2 \times 2$  przedstawić jako liniową kombinację, o rzeczywistych współczynnikach, czterech macierzy hermitowskich:

$$\hat{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

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,



Rysunek A.1. Sfera Blocha jest kulą jednostkową w abstrakcyjnej przestrzeni 3D (tradycyjnie używa się nazwy sfera)

$$\hat{\rho} = \frac{1}{2}(\hat{1} + \mathbf{P} \cdot \hat{\sigma}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 + P_z & P_x - iP_y \\ P_x + iP_y & 1 - P_z \end{pmatrix}.$$
(A.24)

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  $\lambda_1 \lambda_2 \ge 0$  (gdyż równocześnie dla macierzy gęstości qubitu  $\lambda_1 + \lambda_2 = 1$ ). Iloczyn wartości własnych macierzy równy jest jej wyznacznikowi, zatem det $(\hat{\rho}) = (1 - P^2)/4 \ge 0 \rightarrow 0 \le P^2 \le 1$ . Oznacza to, że zbiór macierzy gęstości qubitu jest izomorficzny z kulą jednostkową (nazywaną kulą Blocha).

Zgodnie z przedstawionymi w poprzednim rozdziale 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, co oznacza, że 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.7. 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:  $|1 >_A \otimes |1 >_B$ ,  $|2 >_A \otimes |1 >_B$ ,

 $|1>_A\otimes|2>_B$ ,  $|2>_A\otimes|2>_B$ . 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). Taka baza może mieć postać:

$$\begin{split} |\Psi^{+}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle_{A} \otimes |2\rangle_{B} + |2\rangle_{A} \otimes |1\rangle_{B}), \\ |\Psi^{-}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle_{A} \otimes |2\rangle_{B} - |2\rangle_{A} \otimes |1\rangle_{B}), \\ |\Phi^{+}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle_{A} \otimes |1\rangle_{B} + |2\rangle_{A} \otimes |2\rangle_{B}), \\ |\Phi^{-}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|1\rangle_{A} \otimes |1\rangle_{B} - |2\rangle_{A} \otimes |2\rangle_{B}). \end{split}$$
(A.25)

Wektory te nazywane są stanami Bella, a baza — 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 [10–12] i teleportacji kwantowej [98,99], które przedstawimy skrótowo w następnym podrozdziale.

#### A.8. Protokoły kwantowe

#### Supergęste kodowanie kwantowe

Łatwo zauważyć, że z postaci stanów Bella (podanych równaniami (A.25) wynika, że wykonując tylko lokalne operacje na qubicie B można otrzymać wszystkie stany Bella z jednego, a mianowicie:

$$|1 >_{B} \rightarrow |1 >_{B}, |2 >_{B} \rightarrow |2 >_{B} \implies |\Psi^{+} > \rightarrow |\Psi^{+} >,$$
  

$$|1 >_{B} \rightarrow -|1 >_{B}, |2 >_{B} \rightarrow |2 >_{B} \implies |\Psi^{+} > \rightarrow |\Psi^{-} >,$$
  

$$|1 >_{B} \rightarrow |2 >_{B}, |2 >_{B} \rightarrow |1 >_{B} \implies |\Psi^{+} > \rightarrow |\Phi^{+} >,$$
  

$$|1 >_{B} \rightarrow -|2 >_{B}, |2 >_{B} \rightarrow |1 >_{B} \implies |\Psi^{+} > \rightarrow |\Phi^{-} >.$$
  
(A.26)

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:  $|1 >_A \otimes |1 >_B$ ,  $|2 >_A \otimes |1 >_B$ ,  $|1 >_A \otimes |2 >_B$ ,  $|2 >_A \otimes |2 >_B$  (w tym przypadku także należy kodować na obu qubitach). Jeśli jednak wykorzystać kwantowe splątanie i posłużyć się bazą (A.25), to kodowanie można przeprowadzić tylko na jednym qubicie z pary qubitów. Ten kwantowy efekt nazywany jest supergęstym kodowaniem i może być wykorzystywany do przetwarzania informacji kwantowej [9–13].

#### Teleportacja kwantowa

Drugim ważnym przykładem prostego wykorzystania splatania kwantowego jest zjawisko teleportacji kwantowej [98,99]. Można opisać je w następujący sposób. Załóżmy, że mamy cząstkę A (qubit A) w stanie czystym:  $|\Phi\rangle_A = a_1|1\rangle_A$  $+a_2|2>_A$ ,  $|a_1|^2+|a_1|^2=1$ , i chcemy przesłać (teleportować) ten stan na cząstkę C (qubit C), odległą od cząstki A. W tym celu można posłużyć się cząstką pomocnicza B (qubitem B), w taki sposób, że przygotowujemy pare czastek CBw 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 splatanego można przeprowadzić, posługując się przyrządem pomiarowym realizujacym 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.25), 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.

Załóżmy, 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

$$\begin{aligned} |\Omega \rangle_{ABC} &= |\Phi \rangle_A \otimes |\Psi^- \rangle_{CB} \\ &= (a_1|1 \rangle_A + a_2|2 \rangle_A) \otimes \left(\frac{1}{\sqrt{2}}(|1 \rangle_C \otimes |2 \rangle_B - |2 \rangle_C \otimes |1 \rangle_B)\right) \\ &= |\Psi^+ \rangle_{AB} \otimes (-a_1|1 \rangle_C + a_2|2 \rangle_C) \\ &+ |\Psi^- \rangle_{AB} \otimes (-a_1|1 \rangle_C - a_2|2 \rangle_C) \\ &+ |\Phi^+ \rangle_{AB} \otimes (a_1|2 \rangle_C - a_2|1 \rangle_C) \\ &+ |\Phi^- \rangle_{AB} \otimes (a_1|2 \rangle_C + a_2|1 \rangle_C). \end{aligned}$$
(A.27)

Równość A.27 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:  $|\Psi^+ \rangle_{AB} \otimes |1 \rangle_C$ ,  $|\Psi^- \rangle_{AB} \otimes |1 \rangle_C$ ,  $|\Phi^+ \rangle_{AB} \otimes |1 \rangle_C$ ,  $|\Phi^- \rangle_{AB} \otimes |1 \rangle_C$ ,  $|\Psi^+ \rangle_{AB}$ 

 $\otimes |2 >_C$ ,  $|\Psi^- >_{AB} \otimes |2 >_C$ ,  $|\Phi^+ >_{AB} \otimes |2 >_C$ ,  $|\Phi^- >_{AB} \otimes |2 >_C$ . Przy takim wyborze bazy współczynniki  $a_i$  znajdą się jednak przy qubicie (cząstee *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 wielocząstkowych (wieloqubitowych) układów, przy wykorzystaniu stanów splątanych. Następnie można zbliżyć do siebie cząstki *A* i *B* i dokonać 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.27) zostanie także wtedy wybrany stan czysty cząstki *C*, już tylko z jedną kombinacją nieznanych współczynników  $a_1$  i  $a_2$  (które zamierzaliśmy przeteleportować z qubitu *A* na qubit *C*).

W szczególności, gdy na przykład 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 taki 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 pożądany stan, taki jakim był wejściowy stan na qubicie A.

Aby możliwe było przeprowadzenie 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



Rysunek A.2. Schematyczne przedstawienie procesu teleportacji kwantowej: do cząstki 2, splątanej kwantowo z cząstką 3, doplątuje 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 nie znanym wynikiem pomiaru na parze 1–2)

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 qubitów AB, qubit C odplątuje się i uzyskuje stan czysty. Odbywa się to bez udziału qubitu C, a tylko lokalnie na qubitach A i B (chociaż B był początkowo splątany z C).

# A.9. No-cloning, no-broadcasting, no-deleting dla informacji kwantowej

Nieznany, czysty stan kwantowy nie może być skopiowany [100]. W przeciwnym przypadku prowadziłoby 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 dokonujący kopiowania stanu kwantowego, tj.  $\hat{A}|\Psi\rangle = |\Psi\rangle |\Psi\rangle$ , zatem  $\hat{A}(a_1|1\rangle + a_2|2\rangle) = (a_1|1\rangle + a_2|2\rangle)(a_1|1\rangle + a_2|2\rangle) = a_1^2|1\rangle |1\rangle$   $+a_1a_2|1 > |2 > +a_2a_1|2 > |1 > +a_2^2|2 > |2 >$ . Operator ten jest nieliniowy i dlatego nie może spełnić warunku liniowości (wymaganego przez zasadę superpozycji), gdyż gdyby założyć liniowość, wówczas:  $\hat{A}(a_1|1 > +a_2|2 >) = a_1|1 > |1 > +a_2|2 > |2 > --$  obydwa równania mogą być zgodne tylko wtedy, gdy stan kopiowany to stan |1 > |1b||2 > (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 [101–103]) — wynika to również z niemożności liniowej reprezentacji takiej operacji. No-cloning prowadzi także do niemożności rozpowszechniania informacji kwantowej: no-broadcasting [104,105]. Te cechy informacji kwantowej odróżniają zasadniczo informację kwantową od klasycznej, dla której własności no-cloning, no-deleting, no-broadcasting nie obowiązują.

#### A.10. Ograniczenia kwantowego przetwarzania informacji

Idealne procedury kwantowe, zapewniające realizację kwantowych schematów, zaburzane są przez nieuchronną dekoherencję — niekontrolowany wypływ informacji 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 [14], i w ten sposób zrealizować dowolne procedury dla komputera kwantowego lub innych kwantowych realizacji.

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 wieloqubitowe, 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),

— próbie zamiany nośnika informacji na bardziej odporny na dekoherencję (można czasowo wyteleportować stan na bardziej odporny nośnik).

Wobec wymogów kwantowej korekty błędów podane zostały kryteria (DiVincenzo) [7, 8, 20, 22], które określają możliwość implementacji kwantowej korekty błędów (charakterystyczny czas dekoherencji musi być co najmniej 6 rzędów dłuższy niż charakterystyczny czas operacji kwantowych).

Przyspieszenie w porówna-Autor algorytmu niu z klasycznymi procedurami Algorytm Deutscha i Joz-'Oracle setting', rozróżnieprzyspieszenie eksponennie funkcji zbalansowanej cialne sv. 1992 (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 Algorytm Simona, 1997 Rozróżnienie funkcji wzaprzyspieszenie eksponenjemnie jednoznacznej 1-1 cialne od funkcji 'sklejającej' 2-1 na rejestrze N bitów Znajdowanie liczb pierw-Algorytm Shora dla faktoprzyspieszenie eksponenryzacji, 1994 szych (faktoryzacja) cjalne Transformata Fouriera. Szybka kwantowa transfor-Kitaev, 1995 mata Fouriera — podstawa wszystkich algorytmów kwantowych Algorytm Grovera, 1995 Finding needle in a hayprzyspieszenie kwadratowe *stack*, przeszukiwanie bazy danvch Algorytm Shora kwanto-Kwantowa korekta błędów wej korekty błędów, 1996

Tabela A.1. Algorytmy kwantowe

Rodzaj hardwaru	Liczba	Liczba	Status
0	qubitów	kroków	
	1	przed	
		dekohe-	
		rencją	
Kwantowa kryptografia poje-	1	1	zaimplementowana (produkt
dynczych qubitów			rynkowy)
Kwantowa kryptografia na sta-	2	1	zademonstrowana
nach splątanych			
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. $1 \text{ cm}$ )
Wymiana splątania	4	1	zademonstrowana
Repeater dla kryptografii	kilka	kilka	niekompletna teoria
Kwantowa symulacja	kilka	kilka	prosta demonstracja
Algorytm Grovera z toy-data	3+	6+	zademonstrowany
Ultraprecyzyjny standard czę-	kilka	kilka	przewidywany
stości			
Purifikacja splątania	kilka	kilka	przewidywana
Komputer kwantowy	3 - 5	10-100	zademonstrowane
(toy-demo)	(16?)		
Komputer na spułapowanych			zademonstrowane
jonach 3–5 qubitów			
Komputer spinowy NMR 3–5			zademonstrowane
qubitów			
Komputer nadprzewodnikowy			nie ma pewności co do demon-
			stracji (prywatna firma)
Algorytm Shora z toy-data	16 +	100 +	poszukiwana realizacja
Kwantowa maszyna faktorują-	100 +	1000	
са			
Uniwersalny komputer kwan-	1000 +	1000 +	
towy			

Tabela A.2. Stopień zaawansowania technik informatyki kwantowej

Tabela A.3. Kryteria DiVincenzo dla realizacji komputera kwantowego

1	Odpowiednio zdefiniowany qubit — dwa stany kwantowe oddzielone od pozosta- łych stanów układu (względnie duże odległości energetyczne, wzbronione przej- ścia, tak by informacja w niego wpisana nie ulegała wypływowi)
2	Okreslenie możliwości wpisywania informacji w qubit — tj. możliwości użyska- nia dowolnej superpozycji dwóch stanów qubitu za pomocą zewnętrznego, ma- kroskopowo regulowanego pola (np. oscylacje Rabiego w realistycznym obszarze
	pól)
3	Zaprojektowanie i implementowanie podstawowej operacji dwuqubitowej, o któ- rą oprzeć można by wykonanie dowolnej kwantowej operacji logicznej (taką bramką może być CNOT lub inna, w każdym przypadku konieczne jest opa- nowanie 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	Zapownienie możliwości odczytu informacji na wyjściu
0	Zapewinenie inozitwości odczytu informacji na wysoru
6	Zapewnienie możliwości resetowania całego układu

Tabela A.4. Kryteria DiVincenzo dla realizacji kryptografii kwantowej

1	Określenie swobodnego nośnika informacji — mobilnego qubitu (np. fotonu)
2	Możliwość utrzymania stabilnych kwantowych cech qubitów mobilnych na du-
	żych odległościach
3	Możliwość identyfikacji stanu qubitu (pomiar)

W żadnym z proponowanych obecnie rozwiązań 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 (kilkuqubitowych) nie przekroczono obecnie różnicy 3 rzędów wielkości szybkości operacji kwantowych w stosunku do dekoherencji.

Można się jednak spodziewać, że intensywne poszukiwania rozwiązania tego problemu w kierunku:

kolejna wyliczanka wyliczance

FiXme:

- znalezienia innej metody kwantowej korekty błędów (mimo wysiłków nie ma obecnie odpowiedniej propozycji),
- znalezienia kombinowanego rozwiązania z przerzucanym qubitem (między nośnikiem szybko sterowanym a nośnikiem odporniejszym na dekoherencję – proces konwersji qubitu jest jednak także niekorzystnie ograniczony czasowo),
- znalezienia topologicznych, globalnych i przez to odpornych na dekoherencję nośników informacji kwantowej, w tym
  - grup warkoczowych [17] (i nieabelowych anyonów) tutaj oczekiwać można aż 30 rzędów przewagi czasów operacji logicznych nad dekoherencją [18] (jest jednak niejasne i nie wiadomo czy realistyczne eksperymentalnie),
  - stany nadprzewodzące stwarzają perspektywy osiągnięcia poziomu kryterium DiVincenzo, gdyż stany te są też w dużym stopniu nielokalne.

Wymagania sprzętowe w przypadku kryptografii kwantowej [72, 106–108] nie są tak wygórowane w odniesieniu do dekoherencji i dlatego ta technika kwantowa (dystrybucja klucza publicznego kwantowym kanałem) została zrealizowana w praktyce w układach optycznych (światłowodowych), na odległościach powyżej 10 km, nawet do 1000 km, a w otwartej atmosferze na odległości do 2 km.

### B. Oscylacje Rabiego

Jednoqubitowe operacje — ustawianie dowolnej superpozycji qubitu  $|\Psi\rangle = a_1|1\rangle + a_2|2\rangle$  realizować można za pomocą tzw. oscylacji Rabiego. Rozpatrujemy zaburzenie oscylacyjne o częstości bliskiej (lub równej) odległości energetycznej danej pary poziomów dla ściśle dwupoziomowego układu (qubitu), którym w praktyce, gdy zaniedba się możliwości przejść do innych poziomów, może być atom z dostatecznie odległymi od pozostałych stanów parą poziomów. Rozważmy dwa stany stacjonarne układu dwupoziomowego:

$$H_0|1>=E_1|1>,$$

$$H_0|2>=E_2|2>.$$

Zaburzenie zewnętrzne (dla przykładu, oddziaływanie z falą elektromagnetyczną w przybliżeniu dipolowym<sup>5</sup> w postaci potencjału pola elektromagnetycznego

$$V(t) \sim V_0 \cos(\omega t)$$

prowadzi do zaburzenia hamiltonianu w postaci $^6$ 

$$H' = -\mu_z E = -\mu_z (E_0 e^{i\omega t} + c.c.),$$

gdzie  $\mu_Z$  — moment dipolowy. Pod wpływem tego zaburzenia następuje zależna od czasu (niestacjonarna) ewolucja układu opisana funkcją falową, która może być jednak przedstawiona jako liniowa kombinacja  $|1 > i|_2 >$ , tj.

$$|\Psi(t)\rangle = a_1(t)|1\rangle + a_2(t)|2\rangle$$

i spełnia równanie

$$i \ \hbar \frac{\partial |\Psi(t)>}{\partial t} = (H_0 + H') |\Psi(t)>.$$

Przy założeniu izotropowości stanów |1>i|2>(mamy wtedy $<1||\mu_z|1>=<2|\mu_z|2>=0)$ znajdujemy równania

$$i\hbar \frac{\partial a_1}{\partial t} = a_2 < 1'| - \frac{1}{2}\mu_z E|2' > \left[e^{i(\omega - \omega_0)t} + e^{-i(\omega + \omega_0)t}\right],$$
$$i\hbar \frac{\partial a_2}{\partial t} = a_1 < 1'| - \frac{1}{2}\mu_z E|2' > \left[e^{i(\omega + \omega_0)t} + e^{-i(\omega - \omega_0)t}\right],$$

gdzie  $\omega_0 = \frac{E_2 - E_1}{\hbar}$ , ze stanów stacjonarnych wydzielono funkcje czasowe, tj.  $|i\rangle \ge e^{-iE_it/\hbar}|i'\rangle >.$ 

W tych równaniach pomija się człony szybkozmienne  $e^{\pm i(\omega+\omega_0)}$  (jest to tzw. przybliżenie wirujących osi) [109] – dawałyby one dodatkową drobnooscylacyjną strukturę nałożoną na wolnozmienne zależności. Taka szybkooscylująca 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

$$\frac{\partial^2 a_1}{\partial t^2} - i(\omega - \omega_0)\frac{\partial a_1}{\partial t} + \frac{|x|^2}{4}a_1 = 0,$$

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup> Długość fali znacznie większa niż rozmiary układu.

 $<sup>^{6}</sup>$  Wybieramy pole E wzdłuż osi z.

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 podanych równań otrzymujemy prawdopodobieństwo znajdowania się układu w stanie|1>>

$$|a_1(t)|^2 = \frac{|x|^2}{\Omega^2} \left(\sin\frac{\Omega t}{2}\right)^2$$

(zobacz rys. 2.12). Te oscylacje nazywane są oscylacjami Rabiego. Po tzw.  $\pi$ 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 elektromagnetycznej (np. wiązki laserowej).

Należy dodać, że dla impulsu skończonego w czasie (np.  $\pi$ -impulsu) nie można mieć ściśle monohromatycznej fali elektromagnetycznej — 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 (qubitu), przy zaburzeniu o niezerowym elemencie macierzowym między obydwoma stanami qubitu 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).

### Bibliografia

- [1] L. Jacak, P. Hawrylak, A. Wójs, *Quantum Dots*, Springer Verlag, Berlin, 1998.
- [2] Y. Masumoto, T. Takagahara, Semiconductor Quantum Dots, Springer Verlag, Berlin, 2002.
- [3] R. C. Ashoori, Nature, **379**, 413 (1996).
- [4] L. Jacak, J. Krasnyj, M. Korkusiński, A. Wójs, Phys. Rev. B 57, 9069 (1998).
- [5] L. Jacak, A. Wójs, P. Machnikowski, Semiconductor Quantum Dots, Encyklopedia of Nanoscience and Nanotechnology, American Sc. Publ. 2004, www.aspbs.com/ enn.
- [6] L. Jacak, P. Machnikowski, *Quantum Dots*, Encyklopedia of Nanoscience and Nanotechnology, American Sc. Publ. 2007.
- [7] Quantum Information Processing and Communication—strategic report on current status, ICT European Commission (Ed. P. Zoller) 2005, www.cordis.lu/ist/fet/ qipc.htm.
- [8] Roadmap in Quantum Information, ARDA Report 2002, www.qist.lanl.gov.
- [9] W. Jacak, W. Donderowicz, L. Jacak, Wstęp do informatyki kwantowej, e-script, PWr, Wrocław 2004.
- [10] M. A. Nielsen, I. L. Chuang, Quantum Computation and Quantum Information, Cambridge UP 2000.
- [11] D. Aharonov, Quantum computation, quant-ph/98 12037 (1999).
- [12] S. Stenholm, K.A. Suominen, Quantum Approach to Informatics, Wiley-Interscience, New Jersey, 2005.
- [13] J. Preskill, Quantum Information and Computation, http://www.theory. caltech.edu/~preskill/ph229 (1998).
- [14] D. Bouwmeester, A. Ekert, A. Zeilinger, The Physics of Quantum Information, Springer-Verlag, Berlin, 2000.
- [15] A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, I. E. Dzyaloshinski, Methods of Quantum Field Theory in Statistical Physics, Dover Publications, New York, 1975.
- [16] A. L. Fetter, J. D. Walecka, Kwantowa teoria układów wielu cząstek, PWN, Warszawa, 1982.
- [17] L. Jacak, P. Sitko, K. Wieczorek, A. Wójs, Quantum Hall Systems; braid groups, composite fermions, fractional charge, Oxford UP, Oxford, 2003.
- [18] A. V. Kitajev, Annals Phys. **303**, 2 (2003).
- [19] J. Preskill, *Topological Quantum Computation*, Lecture Notes for Phys. 219, California Inst. Tech. 2005.
- [20] D. Loss, D. P. DiVincenzo, Phys. Rev. A 57, 120 (1998).

- [21] D. P. DiVincenzo, D. Bacon, J. Kempe, G. Burkard, K. B. Whaley, Nature, Nature 408, 339 (2000).
- [22] D. P. DiVincenzo, D. Loss, Superlattices and Microstructures 23, 419 (1998).
- [23] J. M. Kikkawa, D. D. Awschalom, Phys. Rev. Lett. 80, 4313 (1998).
- [24] K. Huang, A. Rhys, Proc. R. Soc. London (A) 204, 406 (1950).
- [25] L. Jacak, J. Krasnyj, W. Jacak, Phys. Lett. A 304, 168 (2002).
- [26] A. C. Davydov, Solid state theory, Nauka, Moskwa, 1976.
- [27] L. D. Landau, E. M. Lifschic, Mechanika kwantowa, PWN, Warszawa, 1979.
- [28] G. D. Mahan, *Many-Particle Physics*, Kluwer, New York, 2000.
- [29] S. Hameau, Y. Guldner, O. Verzelen, R. Ferreira, G. Bastard, J. Zeman, A. Lemaître, J. M. Gerard, Phys. Rev. Lett. 83, 4152 (1999).
- [30] L. Jacak, J. Krasnyj, D. Jacak, P. Machnikowski, Phys. Rev. B 65 113305 (2002).
- [31] L. Jacak, J. Krasnyj, W. Jacak, R. Gonczarek, P. Machnikowski, Phys. Rev. B 72, 245309 (2005).
- [32] O. Verzelen, R. Ferreira, G. Bastard, Phys. Rev. Lett. 88, 146803 (2002).
- [33] P. Borri, W. Langbein, S. Schneider, U. Woggon, R. L. Sellin, D. Ouyang, D. Bimberg, Phys. Rev. Lett. 87, 157401 (2001).
- [34] U. Bockelmann, G. Bastard, Phys. Rev. B 42, 8947 (1990).
- [35] E. A. Muljarov, R. Zimmermann, Phys. Rev. Lett. 98, 187401 (2007).
- [36] L. Jacak, P. Machnikowski, J. Krasnyj, P. Zoller, Eur. Phys. J. D 22, 319 (2003).
- [37] L. Jacak, J. Krasnyj, D. Jacak, P. Machnikowski, Phys. Rev. B 67, 035303 (2003).
- [38] W. Jacak, J. Krasnyj, J. Jacak, The proceedings of the 28th International Conference on the Physics of Semiconductors, http://scitation.aip.org/spinweb/ www.isinet.com/products/citation/proceedings/ (2006).
- [39] A. Suna, Phys. Rep. **135**, A111 (1964).
- [40] V. L. Bonch-Bruevich, S. V. Tyablikov, The Green Function Method in Statistical Mechanics, North-Holland, Amsterdam, 1962.
- [41] C. A. Moskalenko, M. I. Smigliuk, B. I. Chinik, Fiz. Tverdogo Tela 10, 351 (1968).
- [42] S. Adachi, J. Appl. Phys. 58, R1 (1985).
- [43] D. Strauch, B. Dorner, J. Phys. Cond. Matt. 2, 1457 (1990).
- [44] P. Machnikowski, L. Jacak, Phys. Rev. B 71, 115309 (2005).
- [45] C. Pryor, Phys. Rev. B 57, 7190 (1998).
- [46] R. Heitz, I. Mukhametzhanov, O. Stier, A. Madhukar, D. Bimberg, Phys. Rev. Lett. 83, 4654 (1999).
- [47] A. Garcia-Cristóbal, A. W. E. Minnaert, V. M. Fomin, J. T. Devrese, A. Y. Silov, J. E. M. Haverkort, J. H. Wolter, Phys. Stat. Sol. (b) **215**, 331 (1999).
- [48] L. Jacak, J. Krasnyj, A. Wójs, Physica B **229**, 279 (1997).
- [49] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, Solid State Physics, Holt, Rinehardt and Winston, New York, 1976.
- [50] L. Jacak, J. Krasnyj, D. Jacak, W. Salejda, A. Mituś, Acta. Phys. Pol. A 99, 277 (2001).
- [51] T. Calarco, A. Datta, P. Fedichev, E. Pazy, P. Zoller, Phys. Rev. A 68, 12310 (2003).
- [52] T. Story, R. R. Gałązka, R. B. Frankel, P. A. Wolff, Phys. Rev. Lett. 56, 777 (1986).

- [53] H. Ohno, H. Munekata, T. Penney, S. von Milnár, L. L. Chang, Phys. Rev. Lett. 68, 2664 (1992).
- [54] J. K. Furdyna, J. Appl. Phys. 64, R29 (1988).
- [55] T. Dietl, H. Ohno, F. Matsukura, Phys. Rev. B 63, 195205 (2001).
- [56] D. Ferrand, J. Cibert, A. Wasiela, C. Bourgognon, S. Tatarenko, G. Fishman, T. Andrearczyk, J. Jaroszyński, S. Koleśnik, T. Dietl, B. Barbara, and D. Dufeu, Phys. Rev B 63, 085201 (2001).
- [57] T. Dietl, H. Ohno, F. Matsukura, J. Cibert, D. Ferrand, Science 287, 1019 (2000).
- [58] T. Dietl, Semicond. Sci. Technol., 17, 377 (2002).
- [59] H. Ohno, Science **281**, 951 (1998).
- [60] S. Das Sarma, E. H. Hwang, A. Kaminski, Phys. Rev. B 67, 155201 (2003).
- [61] M. Csontos, G. Mihaly, B. Jankó, T. Wojtowicz, X. Liu, J. K. Furdyna, Nature Materials 4, 447 (2005).
- [62] W. Jacak, J. Krasnyj, L. Jacak, S. Kaim, Phys. Rev. B 76, 165208 (2007).
- [63] W. Jacak, J. Krasnyj, L. Jacak, Phys. Rev. B 78, 073303 (2008).
- [64] N. P. Kovalenko, J. Krasnyj, U. Krey, *Physics of Amorphous Metals*, Wiley-CH, Berlin, 2001.
- [65] Ch. Kittel, Quantum Theory of Solids, John Willey, New York, 1968.
- [66] A. I. Akhieser, V. G. Baryakhtar, S. V. Peletminskii, Spin Waves, North Holland, Amsterdam, 1968.
- [67] R. Alicki, M. Horodecki, P. Horodecki, R. Horodecki, L. Jacak, P. Machnikowski, Phys. Rev. A 70, 010501 (2004).
- [68] X. Li, Y. Wu, D. Steel, D. Gammon, T. Stievater, D. Katzer, D. Park, C. Piermarocchi, L. Sham, Science 301, 809 (2003).
- [69] T. H. Stievater, X. Li, D. G. Steel, D. Gammon, D. S. Katzer, D. Park, C. Piermarocchi, L. J. Sham, Phys. Rev. Lett. 87, 133603 (2001).
- [70] A. Zrenner, E. Beham, S. Stufler, F. Findeis, M. Bichler, G. Abstreiter, Nature 418, 612 (2002).
- [71] M. Bayer, P. Hawrylak, K. Hinzer, S. Fafard, M. Korkusinski, Z. R. Wasilewski, O. Stern, A. Forchel, Science 291, 451 (2001).
- [72] C. H. Bennett, Phys. Rev. Lett. 68, 3121, (1992).
- [73] E. Knill, Nature **434**, 39 (2005).
- [74] Yu. Semenov, V. Stephanovich, Phys.Rev. B 67, 195203 (2003).
- [75] R. Shioda, K. Ando, T. Hayashi, M. Tanaka, Phys.Rev. B 58, 1100 (1998).
- [76] T. Jungwirth, J. Masek, K.Y. Wang, K.W. Edmonds, M. Sawicki, M. Polini, Jairo 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, Phys. Rev. B 73, 165205 (2006).
- [77] J. König, H. Lin, A. H. MacDonald, Phys. Rev. Lett. 84, 5628 (2000).
- [78] J. König, T. Jungwirth, A. H. MacDonald, Phys. Rev B 64, 184423 (2001).
- [79] M. Berciu R. N. Bhatt, Phys. Rev. B 66, 085207 (2002).
- [80] J. Schliemann, J. König, A. H. MacDonald, Phys. Rev. B 64, 165201 (2001).
- [81] H. Ohno, A. Shen, F. Matsukura, A. Oiwa, A. Endo, S. Katsumoto, Y. Iye, Appl. Phys. Lett. 69, 363 (1996).
- [82] F. Matsukura, H. Ohno, A. Shen, Y. Sugawara, Phys. Rev. B 57, R2037 (1998).

- [83] N. Theodoropoulos, A. F. Hebard, M. E. Overberg, C. R. Abernathy, S. J. Pearton, S. N. G. Chu, R. G. Wilson, Appl. Phys. Lett. 78, 3474 (2001).
- [84] S. Sonoda, S. Shimizu, T. Sasaki, Y. Yamamoto, H. Hori, J. Cryst. Growth 273, 1358 (2002).
- [85] O. Sakai, S. Suzuki, K. Nishizawa, J. Phys. Soc. Jap. 70, 1045 (2001).
- [86] J. Seufert, G. Bacher, M. Scheibner, A. Forchel, S. Lee, M. Dobrowolska, J. K. Furdyna, Phys. Rev. Lett. 88, 027402 (2002).
- [87] H. Schömig, M. K. Welsch, G. Bacher, A. Forchel, S. Zaitsev, A. A. Maksimov, V. D. Kulakovskii, S. Lee, M. Dobrowolska, J. K. Furdyna, Physica E 13, 512 (2002).
- [88] J. Seufert, M. Scheibner, G. Bacher, A. Forchel, S. Lee, M. Dobrowolska, J. K. Furdyna, Phys. Stat. Sol (b) 229, 727 (2002).
- [89] D. Pines, Elementary Excitations in Solids, W.A. Benjamin, New York, 1963.
- [90] S.W. Wonsovskij, Magnetism, Nauka, Moskwa 1971.
- [91] D. Zubariev, Nierównowagowa fizyka statystyczna, PWN, Warszawa 1976.
- [92] N. Gershenfeld, The Physics of Information Technology, Cambridge University Press, Cambridge 2000.
- [93] A. S. Cholevo, Wierojatnostnyje i statisticzeskije aspekty kwantowoj tieorii, Nauka, Moskwa, 1980.
- [94] W. H. Żurek, Phys. Rev. D 26, 1862 (1982).
- [95] W. H. Żurek, Rev. Modern Phys., **75**, 715 (2003).
- [96] Encyklopedia fizyki współczesnej, PWN, Warszawa 1983.
- [97] Encyklopedia fizyki, PWN, Warszawa 1974.
- [98] C. H. Bennett, D. DiVincenzo, J. A. Smolin, and W. K. Wootters Phys. Rev. Lett. 70, 1895 (1993).
- [99] D. Bouwmeester, J. W. Pan, K. Mattle, M. Eibl, H. Weinfurter, A. Zeilinger, Nature **390**, 575 (1997).
- [100] W. K. Wootters, W. H. Żurek, Nature **299**, 802 (1982).
- [101] A. K. Pati, S. L. Braunstein, Nature **404**, 164 (2000).
- [102] A. K. Pati, S. L. Braunstein, arXiv:quant-ph/0305145v1 (2003).
- [103] W. H. Żurek, Nature **404**, 130 (2000).
- [104] H. Barnum, Phys. Rev. Lett. **76**, 2818-2821 (1996).
- [105] D. Gottesman, I. L. Chuang, Nature **402**, 390 (1999).
- [106] A. Ekert, J. Rarity, P. Tapster, G. M. Palma, Phys. Rev. Lett. 69, 1293, (1992).
- [107] P. D. Townsend, Electron. Lett. **33-3**, 188-190, (1997).
- [108] C. H. Bennett, G. Brassard, Proceedings IEEE International Conference on Computers, Systems and Signal Processing, (1984).
- [109] K. Shimoda, Wstęp do fizyki laserów, PWN, Warszawa, 1993.