

Влияние спин-орбитального взаимодействия на структуру основного состояния электронов в кремниевых нанокристаллах

© А.А. Конаков^{*,†}, Н.В. Курова⁺, В.А. Бурдов⁺

⁺Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского, 603950 Нижний Новгород, Россия

^{*} Научно-исследовательский физико-технический институт Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского, 603950 Нижний Новгород, Россия

(Получена 22 апреля 2013 г. Принята к печати 30 апреля 2013 г.)

С использованием приближения огибающей и $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -метода теоретически исследуется влияние спин-орбитального взаимодействия на структуру основного состояния в зоне проводимости кремниевых нанокристаллов сферической формы. Показано, что возникающая слабая спин-орбитальная связь зоны проводимости и валентной зоны приводит к специфической несимметричной гибридизации огибающих функций s - и p -типа с противоположной ориентацией спина, связанной с анизотропией спинового смешивания в зоне проводимости кремния. В результате происходит перестройка волновых функций основного состояния, сопровождаемая незначительным уменьшением его энергии. При этом параметр спинового смешивания в нанокристаллах существенно зависит от их размера вследствие эффекта размерного квантования.

1. Введение

В последние годы кремний — основной материал микроэлектроники — привлекает внимание еще и как перспективный элемент для построения приборов на спиновых эффектах за счет больших времен спиновой релаксации и длин спиновой диффузии электронов проводимости в сравнении с типичными полупроводниками $A^{III}B^V$, такими как арсенид галлия [1]. Одной из ключевых задач спинтроники является поиск технологического решения, позволяющего увеличить масштаб канала для передачи спина и тем самым расширить потенциальные возможности для построения спиновых приборов. Как известно, такого результата можно достичь путем понижения размерности системы, приводящего к уменьшению скорости спиновой релаксации носителей и возрастанию длины их спиновой диффузии [2]. В связи с этим представляется перспективным использование упорядоченных массивов кремниевых нанокристаллов, сформированных в различных матрицах. В нанокристаллах, как и в объемном кремнии, сохраняется слабость спин-орбитального взаимодействия, определяющая низкую эффективность процессов переворота спина, и, кроме того, эффект размерного квантования для носителей заряда делает возможным дальнейшее уменьшение скорости релаксации спиновых возбуждений.

Несмотря на то что электронные [3–6], оптические [5,7,8] и электрические [8–10] свойства кремниевых кристаллитов изучаются уже достаточно давно, в ходе теоретических расчетов и анализа экспериментальных результатов эффектами спин-орбитального взаимодействия ввиду их малости, как правило, пренебрегают. Если влияние спин-орбитального взаимодействия на состояния валентной зоны (дырочные уровни) в нанокристаллах кремния ранее изучалось в ряде работ

на основе приближения огибающей [11–13], то в зоне проводимости оно просто не принималось во внимание. Вблизи потолка валентной зоны в отсутствие спин-орбитального взаимодействия электронные блоховские функции образуют орбитальный триплет, преобразующийся по неприводимому представлению Γ'_{25} группы волнового вектора Γ -точки структуры алмаза. Учет спин-орбитального взаимодействия приводит к перемешиванию координатных частей блоховских функций и частичному снятию трехкратного орбитального вырождения посредством формирования отщепленной зоны со спин-орбитальной щелью $\Delta_{s,o} \approx 42.62$ мэВ [14].

В то же время вблизи дна зоны проводимости электронные волновые функции не обладают орбитальным моментом (в бесспиновом пределе в каждом из 6 минимумов зоны проводимости периодические части блоховских функций преобразуются по единичному неприводимому представлению Δ_1 точечной группы C_{4v}). По этой причине само по себе спин-орбитальное взаимодействие не приводит к снятию двукратного вырождения по спину, а ввиду своей малости практически не влияет на значения энергий электронов. Однако спин-орбитальное взаимодействие приводит к межзонному смешиванию состояний с противоположным направлением спина, так что электронные волновые функции перестают быть „чистыми“ по спину [15]. Такое спиновое смешивание определяет скорости спиновой релаксации электронов по механизму Эллиотта [15] и Яфета [16]. Поскольку вследствие эффекта размерного квантования оно может заметно видоизменяться в нанокристаллах в сравнении с объемным кремнием, а механизм спиновой релаксации Эллиотта–Яфета будет оставаться доминирующим, то для дальнейшего анализа динамических спиновых явлений в нанокристаллах кремния необходимы расчеты спиновой структуры зоны проводимости, в особенности основного состояния, которые к настоящему времени

[†] E-mail: anton.a.konakov@gmail.com

еще не проводились. Данная работа посвящена решению этой задачи.

2. Теоретическая модель

Будем рассматривать сферическую кремниевую квантовую точку радиуса R в матрице широкозонного диэлектрика, такого как диоксид кремния или оксид алюминия. В силу того что характерные значения разрывов обеих зон на границе кремний/диэлектрик (например, в случае диоксида кремния они составляют 4.5 и 3.3 эВ для валентной зоны и зоны проводимости соответственно [17]) являются достаточно большими величинами в сравнении с характерными энергиями размерного квантования носителей, электронные состояния будем описывать моделью бесконечно глубокой потенциальной ямы. Эта модель, несмотря на известное завышение значений энергии электронов и дырок в нанокристаллах [18], позволяет правильно описать иерархию и симметрию квантовых состояний. Диэлектрическое окружение будем полагать аморфным, чтобы можно было пренебречь механическими напряжениями на границе нанокристалла. Также для простоты расчетов будем пренебрегать эффектами кулоновского взаимодействия носителей с полями собственных изображений.

Для решения задачи воспользуемся приближением огибающей функции в совокупности с $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -методом. Следуя работе [19], будем описывать электронные состояния в нанокристаллах в блоховском базисе двукратно вырожденной (без учета спина) X -точки зоны проводимости (симметрия X_1). В бесспиновом пределе $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -гамильтониан электрона в окрестности X -точки в направлении a может быть выбран в виде [20]

$$\hat{H}_a^{2 \times 2} = \begin{pmatrix} \frac{\hat{p}_a^2}{2m_l} + \frac{\hat{p}^2 - \hat{p}_a^2}{2m_t} & \left(\frac{1}{m_t} - \frac{1}{m_0}\right) \hat{p}_b \hat{p}_c + i \frac{p_0}{m_l} \hat{p}_a \\ \left(\frac{1}{m_t} - \frac{1}{m_0}\right) \hat{p}_b \hat{p}_c - i \frac{p_0}{m_l} \hat{p}_a & \frac{\hat{p}_a^2}{2m_l} + \frac{\hat{p}^2 - \hat{p}_a^2}{2m_t} \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где $m_l \approx 0.92m_0$ и $m_t \approx 0.19m_0$ (m_0 — масса свободного электрона) [21] имеют смысл продольной и поперечной эффективных масс вблизи дна зоны проводимости, а $p_0 = \hbar k_0 \approx 0.146 \cdot 2\pi\hbar/a_0$ (\hbar — постоянная Планка, a_0 — параметр решетки кремния) [22] является расстоянием в импульсном пространстве между одной из точек X и ближайшим к ней минимумом зоны проводимости. Полная электронная волновая функция может быть в общем случае представлена в виде линейной комбинации волновых функций всех трех неэквивалентных X -точек зоны проводимости с произвольными коэффициентами:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{A=X,Y,Z} [C_A F_A(\mathbf{r})|A\rangle + C'_A F'_A(\mathbf{r})|A'\rangle], \quad (2)$$

где $|A\rangle$ и $|A'\rangle$ — блоховские функции в точке X вдоль направления a зоны проводимости, $F_A(\mathbf{r})$ и $F'_A(\mathbf{r})$ — соответствующие им компоненты огибающей, определяемые

в ходе решения уравнения на собственные функции и собственные значения гамильтониана (1). Коэффициенты C_A и C'_A должны удовлетворять условию нормировки волновой функции (2) на единицу.

Как было указано выше, при учете спин-орбитального взаимодействия

$$\hat{H}_{so} \propto \hat{l}_x \hat{\sigma}_x + \hat{l}_y \hat{\sigma}_y + \hat{l}_z \hat{\sigma}_z, \quad (3)$$

где \hat{l}_a обозначают компоненты орбитального момента, а $\hat{\sigma}_a$ — матрицы Паули, блоховские функции в зоне проводимости кремния перестают быть „чистыми“ по спину [10]. В силу малости \hat{H}_{so} в кремнии по сравнению со скалярным кристаллическим потенциалом будем учитывать спин-орбитальное взаимодействие по теории возмущений. Допустим, что в рассматриваемой системе существует некое выделенное направление, по которому удобно выбрать ось квантования спина, и пусть оно ориентировано вдоль кристаллографической оси [001]. Выбирая, как обычно, в качестве спинового базиса собственные состояния матрицы $\hat{\sigma}_z$, находим, что операторы $\hat{l}_x \hat{\sigma}_x$ и $\hat{l}_y \hat{\sigma}_y$ могут подмешивать к „чистым“ по спину волновым функциям зоны проводимости состояния других зон с противоположным направлением спина, в частности ближайшей по энергии валентной зоны. Фактически возникает межзонная спин-орбитальная связь, которая приводит к изменению $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -гамильтониана и необходимости учета дополнительных связанных с ней слагаемых при расчете электронного спектра.

Периодические части блоховских функций валентной зоны в кремнии, подмешиваемых спин-орбитальным взаимодействием к блоховским функциям зоны проводимости, преобразуются по двумерному неприводимому представлению Δ_5 точечной группы C_{4v} — как две координаты, ортогональные оси долины (ось C_4). Так, если направление Δ соответствует направлению [001] зоны Бриллюэна (z -долина), они преобразуются подобно координатам x и y . В этом случае компоненты орбитального момента \hat{l}_x и \hat{l}_y могут подмешивать к электронным состояниям зоны проводимости обе функции, x - и y -типа. В x - и y -долинах к функции Δ_1 зоны проводимости можно подмешать состояния Δ_5 валентной зоны с противоположным спином только с симметрией z -типа. Таким образом, вблизи дна зоны проводимости кремния спиновое смешивание, обусловленное спин-орбитальным взаимодействием, обладает долинной анизотропией: оно различается в продольном и поперечном по отношению к оси квантования спина направлениях [23].

Спин-орбитальная связь зоны проводимости и валентной зоны непосредственно в окрестности X -точки зоны Бриллюэна была рассмотрена в работе [24]: учет \hat{H}_{so} приводит к смешиванию состояний X_1 зоны проводимости и нижележащих состояний X_4 валентной зоны. Принимая во внимание, что спин-орбитальное взаимодействие не снимает двукратное орбитальное вырождение в точке X [25], можно, опуская некоторые промежуточные

выкладки, записать электронный $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -гамильтониан в базисе X_1 в a -долине в следующем виде:

$$\hat{H}_a^{4 \times 4} = \begin{pmatrix} \hat{H}_a^{2 \times 2} & 0 \\ 0 & \hat{H}_a^{2 \times 2} \end{pmatrix} + \hat{H}_a^{cv}, \quad (4)$$

где первое слагаемое представляет собой гамильтониан (1), расширенный с учетом спина, а второе, \hat{H}_a^{cv} , описывает смешивание состояний с противоположным спином, индуцированное межзонной спин-орбитальной связью. С учетом долиной анизотропии оно может быть записано в виде

$$\hat{H}_z^{cv} = Q \begin{pmatrix} 0 & 0 & -\hat{p}_+ & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \hat{p}_+ \\ -\hat{p}_- & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \hat{p}_- & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5)$$

$$\hat{H}_{x(y)}^{cv} = Q \begin{pmatrix} -\hat{p}_{y(x)} & 0 & \hat{p}_z & 0 \\ 0 & \hat{p}_{y(x)} & 0 & -\hat{p}_z \\ \hat{p}_z & 0 & \hat{p}_{y(x)} & 0 \\ 0 & -\hat{p}_z & 0 & -\hat{p}_{y(x)} \end{pmatrix}, \quad (6)$$

где введены операторы $\hat{p}_{\pm} = \hat{p}_x \pm i\hat{p}_y = (\hat{p}_{\mp})^\dagger$, параметр межзонной спин-орбитальной связи $Q = 2\Delta_X P_{cv} / \hbar E_{g,x}$, $E_{g,x} \approx 4.3$ эВ [26] — прямая энергетическая щель между зонами проводимости и валентной в X -точке, а положительные постоянные $\Delta_X \approx 3.5$ мэВ [24] и $P_{cv} \approx 0.9$ эВ·нм [21] являются модулями матричных элементов операторов \hat{H}_{so} и $\hbar\hat{\mathbf{p}}/m_0$ относительно блоховских состояний X_1 зоны проводимости и X_4 валентной зоны. Полученный $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -гамильтониан (4) представляет собой естественное обобщение исходного бесспинового гамильтониана (1) на случай наличия спин-орбитальной связи зоны проводимости и валентной зоны.

Рассмотрим подробно второе слагаемое в (4). Сопоставляя (1), (5) и (6), видим, что поправка в электронный гамильтониан, связанная с влиянием спин-орбитального взаимодействия, линейна по электронному импульсу, подобно недиагональным членам $i p_0 \hat{p}_a / m_l$ в исходном бесспиновом гамильтониане $\hat{H}_a^{2 \times 2}$. Сравним эти вклады по абсолютной величине. Как известно, величина P_{cv} определяет поперечную массу m_t электронов в кремнии [21], так что можно записать

$$\frac{1}{m_t} \approx \frac{1}{m_0} + \frac{2P_{cv}^2}{\hbar^2 E_{g,x}}. \quad (7)$$

Сравнивая (7) с (5) или (6), заключаем, что

$$Q \approx \left(\frac{1}{m_t} - \frac{1}{m_0} \right) \frac{\Delta_X \hbar}{P_{cv}} \approx \frac{\hbar}{m_0} \frac{4\Delta_X}{P_{cv}}, \quad (8)$$

в то время как $p_0 / m_l \approx \hbar k_0 / m_0$. Используя приведенные выше численные значения для k_0 , Δ_X и P_{cv} , получаем, что вклад от межзонной спин-орбитальной связи в (4) по

абсолютной величине на 2 порядка меньше, чем недиагональные линейные члены в исходном гамильтониане (1). Это является следствием малости спин-орбитального взаимодействия в кремнии по сравнению со скалярным периодическим потенциалом.

Определение электронного спектра в зоне проводимости кристаллита сводится теперь к отысканию собственных значений и собственных функций гамильтониана (4) в пространстве огибающих с учетом нулевых граничных условий ввиду использования приближения бесконечно глубокой потенциальной ямы для носителей. Решение этой задачи в бесспиновом пределе методом теории возмущений подробно изложено в [19]. Следуя этой работе, в качестве нулевого приближения вблизи каждой точки X зоны проводимости примем гамильтониан $\hat{H}_a^{(0)} = (\hat{\mathbf{p}}^2 / 2m_e) / \hat{E}$, полученный усреднением (1) по направлениям в \mathbf{k} -пространстве, где $m_e^{-1} = (m_l^{-1} + 2m_t^{-1}) / 3$ — обратная изотропная эффективная масса электрона, а \hat{E} — единичная матрица 4×4 . Все прочие диагональные и недиагональные члены в $\hat{H}_a^{4 \times 4}$ будем учитывать как возмущение, выполняя разложение по базисным функциям гамильтониана нулевого приближения, которые представляют собой собственные функции электрона в бесконечно глубокой сферической потенциальной яме. Далее этот подход применяется для исследования тонкой структуры основного состояния в зоне проводимости кремниевых нанокристаллов.

3. Результаты расчетов и их обсуждение

Как показано в [19], в бесспиновом пределе энергия основного состояния в зоне проводимости кремниевых квантовых точек является 6-кратно вырожденной, поскольку каждый из трех гамильтонианов $\hat{H}_a^{2 \times 2}$ имеет одно и то же двукратно вырожденное собственное значение в основном состоянии, волновые функции которого получаются в результате гибридизации огибающих функций s - и p_a -типа. Если принять во внимание еще и спин, то кратность вырождения основного состояния увеличивается до 12 и является по сути такой же, как в объемном кремнии.

При учете спин-орбитального взаимодействия электронный гамильтониан в окрестности каждой X -точки перестает быть диагональным по спину. Как видно из (5) или (6), наличие таких недиагональных блоков в $\hat{H}_a^{4 \times 4}$ приводит к подмешиванию к огибающим функциям s -типа помимо продольных p -функций еще и двух других поперечных p -функций. Детальный анализ показывает, что в X -точке, находящейся на направлении [100], к $s-p_x$ -гибридизованной огибающей с фиксированным направлением спина (будем считать для определенности, что со спином „вверх“) подмешиваются еще p_y -орбиталь с сонаправленным спином и p_z -функция с противоположным. Аналогичная ситуация возникает и в направ-

лении [010], где $s-p_y$ -гибридизованная функция со спином „вверх“ также модифицируется огибающей p_z -типа, характеризующейся спином „вниз“, и p_x -орбиталью со спином „вверх“. В то же время в направлении [001] (вдоль оси квантования спина) обе поперечные функции p -типа, p_x и p_y , подмешиваются к $s-p_z$ -функции с противоположной проекцией спина. Возникшая анизотропия в смешивании огибающих функций приводит к некоторой „выделенности“ волновых функций в базисе X -точки на направлении [001]: подмешивание состояний с противоположным спином оказывается в 2 раза „эффективнее“, чем на других направлениях с вращательной симметрией 4-го порядка в зоне Бриллюэна. При этом спин-орбитальное взаимодействие не приводит к снятию вырождения в зоне проводимости, так что нижний энергетический уровень в спектре, отвечающий каждому гамильтониану $\hat{H}_a^{4 \times 4}$, остается 4-кратно вырожденным. Кроме того, такая „выделенность“ состояний в направлении квантования спина не приводит к снятию энергетического вырождения X -точек на различных направлениях, так что основное электронное состояние в нанокристалле остается 12-кратно вырожденным и при учете спин-орбитального взаимодействия, несмотря на перестройку основного состояния.

Изменение структуры основного состояния может быть объяснено следующим образом. Гамильтониан спин-орбитального взаимодействия \hat{H}_{so} в нанокристаллах действует, строго говоря, не только на блоховские функции, но и на полные волновые функции электронов, включающие еще и огибающие. При этом составляющие $\hat{l}_x \hat{\sigma}_x$ и $\hat{l}_y \hat{\sigma}_y$, отвечающие за смешивание состояний с противоположным спином, могут приводить к гибридизации огибающих функций, обладающих отличным на единицу орбитальным моментом, т.е. открывают возможность дополнительной $s-p$ -гибридизации. Однако компонента орбитального момента \hat{l}_z остается выделенной среди прочих в силу того, что оператор $\hat{l}_z \hat{\sigma}_z$ не может смешивать состояния с противоположными спинами, что приводит, в свою очередь, к выделенной роли z -направления не только в обратном пространстве, но и в пространстве огибающих функций, а вместе с ним и к выделенной роли $s-p_z$ -гибридизованной волновой функции. Именно такая специфическая гибридизация огибающих и будет определять скорости релаксационных спиновых процессов при взаимодействии электронов, локализованных в нанокристалле, с фононами или статическими дефектами структуры, а также в транспортных процессах в ансамбле нанокристаллов.

Наши расчеты показывают, что с учетом спин-орбитального взаимодействия энергия основного состояния в зоне проводимости несколько уменьшается по сравнению с ее значением в бесспиновом пределе. Это фактически свидетельствует о том, что в условиях полного трехмерного ограничения движения носителей заряда спин-орбитальное взаимодействие обладает свойством эффективного притяжения. Однако наши оценки

показывают, что величина этого сдвига составляет величину $\sim 10^{-5}$ эВ в нанокристаллах с размерами от 2 до 6 нм вследствие малости спин-орбитальной связи. Очевидно, такой сдвиг может не приниматься во внимание в сравнении с характерными энергиями размерного квантования электронов.

Несмотря на сохранение иерархии энергетических уровней в зоне проводимости, спин-орбитальное взаимодействие приводит к формированию анизотропно-смешанных по спину волновых функций. Основным количественным критерием, определяющим модификацию электронных состояний межзонной спин-орбитальной связью, является безразмерный параметр спинового смешивания, который для каждого квантового состояния может быть введен, согласно [23], как отношение плотностей меньшей и большей компонент спинора. Эта величина является функцией радиуса нанокристалла в силу эффекта квантового конфайнмента и в направлении z (вдоль оси квантования спина) может быть определена как

$$b_z(R) \approx \frac{2Q^2 |p_{sp}|^2}{(E_p - E_0)^2}, \quad (9)$$

где E_0 и E_p — энергии $s-p_z$ -гибридизованного уровня основного состояния и p -уровня первого возбужденного состояния гамильтониана нулевого приближения $\hat{H}_z^{(0)}$, а p_{sp} — матричный элемент оператора импульса между огибающими функциями s - и p -типа. В рассматриваемой нами модели бесконечно глубокой сферической потенциальной ямы

$$E_p = \hbar^2 \mu_1^2 / 2m_e R^2, \quad (10)$$

$$|p_{sp}| = \frac{2\pi \hbar \mu_1}{\sqrt{3}(\mu_1^2 - \pi^2)R}, \quad (11)$$

где $\mu_1 \approx 4.49$ — наименьший корень сферической функции Бесселя $j_1(x)$, а энергия E_0 как функция радиуса кристаллита определена в [19] (она имеет более громоздкое строение, поэтому здесь мы ее не приводим).

Для волновых функций в базисе X -точек на направлениях [100] и [010] зоны Бриллюэна параметры спинового смешивания вдвое меньше — $b_{x(y)}(R) = b_z(R)/2$, что фактически и является количественным критерием долиной спиновой анизотропии. Расчеты показывают, что в нанокристаллах с размерами от 2 до 6 нм параметр спинового смешивания $b_z(R)$ изменяется практически линейно с ростом радиуса кристаллита от $\sim 0.5 \cdot 10^{-5}$ до $\sim 2.5 \cdot 10^{-5}$. Это, в частности, означает, что с уменьшением размера нанокристалла должна снижаться вероятность нестационарных процессов, идущих с перевертыванием спина.

4. Заключение

В работе с использованием приближения огибающей функции и $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -метода выполнены расчеты тонкой структуры основного состояния в зоне проводимости

сферических кремниевых квантовых точек, внедренных в матрицу широкозонного диэлектрика, обусловленной наличием спин-орбитального взаимодействия и, как следствие, спин-орбитальной связи валентной зоны и зоны проводимости. Мы нашли, что межзонная спин-орбитальная связь дополнительно к смешиванию огибающих функций s - и продольного p -типа, связанному с анизотропией кремниевой электронной структуры вблизи дна зоны проводимости, подмешивает к s -функциям еще и поперечные p -орбитали, включая те, что характеризуются противоположным значением проекции спина. Такое смешивание обладает долиной анизотропией: вдоль оси квантования спина оно вдвое больше, чем в направлениях, ей перпендикулярных. В частности, квадруплет, образованный в базисе X [001], описывается волновыми функциями, полученными в результате гибридизации $s-p_z$ -состояний с p_x - и p_y -состояниями с противоположным направлением спина. Волновые функции октета (базис $X \perp$ [001]) возникают посредством спинового смешивания $s-p_x$ - и $s-p_y$ -состояний с состояниями p_z -типа. Спин-орбитальное взаимодействие в совокупности с эффектом квантового конфайнмента приводит к незначительному уменьшению энергии основного состояния в нанокристалле и, что более существенно, к зависимости спинового смешивания от размера нанокристалла. При этом важно подчеркнуть, что квантовый конфайнмент заметно ослабляет спиновое смешивание.

Работа поддержана РФФИ (гранты № 12-02-00576-а, 12-02-31697-мол_а, 12-07-00546-а, 12-07-31232-мол_а), Министерством образования и науки РФ в рамках соглашения 14.В37.21.1502 и Фондом некоммерческих программ „Династия“.

Список литературы

- [1] R. Jansen, S.P. Dash, S. Sharma, B.C. Min. *Semicond. Sci. Technol.*, **27**, 083 001 (2012).
- [2] M.W. Wu, J.H. Jiang, M.Q. Weng. *Phys. Reports*, **493**, 61 (2010).
- [3] A.C. Москаленко, И.Н. Ясиевич. *ФТТ*, **46**, 1465 (2004).
- [4] G.D. Scholes, G. Rumbles. *Nature Materials*, **5**, 683 (2006).
- [5] V.A. Belyakov, V.A. Burdov, R. Lockwood, A. Meldrum. *Adv. Opt. Technol.*, **2008**, 279 502 (2008).
- [6] E.G. Barbagiovanni, D.J. Lockwood, P.J. Simpson, L.V. Goncharova. *J. Appl. Phys.*, **111**, 034 307 (2012).
- [7] О.Б. Гусев, А.Н. Поддубный, А.А. Прокофьев, И.Н. Ясиевич. *ФТП*, **47**, 147 (2013).
- [8] S.K. Ray, S. Mailap, W. Banerjee, S. Das. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, **46**, 153 001 (2013).
- [9] I. Balberg, J. Jedrzejewski, E. Savir. *Phys. Rev. B*, **83**, 035 318 (2011).
- [10] V.A. Belyakov, V.A. Burdov. *J. Comput. Theor. Nanosci.*, **8**, 365 (2011).
- [11] D.H. Feng, Z.Z. Xu, T.Q. Jia, X.X. Li, S.Q. Gong. *Phys. Rev. B*, **68**, 035 334 (2003).
- [12] A.S. Moskalenko, J. Berakdar, A.A. Prokofiev, I.N. Yassievich. *Phys. Rev. B*, **76**, 085 427 (2007).
- [13] V.A. Belyakov, V.A. Burdov. *J. Phys.: Condens. Matter*, **20**, 025 213 (2008).
- [14] Z. Yu, Y.X. Huang, S.C. Shen. *Phys. Rev. B*, **39**, 6287 (1989).
- [15] R.J. Elliott. *Phys. Rev.*, **96**, 266 (1954).
- [16] Y. Yafet. In: *Solid State Physics*, ed. by F. Seitz, D. Turnbull (N.Y.–London, Academic Press, 1963) v. 14, p. 1.
- [17] E. Bersch, S. Rangam, R.A. Bartynski, E. Garfunkel, E. Vescovo. *Phys. Rev. B*, **78**, 085 114 (2008).
- [18] В.А. Бурдов. *ФТП*, **36**, 1233 (2002).
- [19] В.А. Бурдов. *ЖЭТФ*, **121**, 480 (2002).
- [20] А.А. Копылов. *ФТП*, **16**, 2141 (1982).
- [21] J.C. Hensel, H. Hasegawa, M. Nakayama. *Phys. Rev.*, **138**, A225 (1965).
- [22] J.L. Ivey, R.L. Miehler. *Phys. Rev. B*, **11**, 822 (1975).
- [23] J.L. Cheng, M.W. Wu, J. Fabian. *Phys. Rev. Lett.*, **104**, 016 601 (2010).
- [24] P. Li, H. Dery. *Phys. Rev. Lett.*, **107**, 107 203 (2011).
- [25] L. Liu. *Phys. Rev. Lett.*, **6**, 683 (1961).
- [26] J.R. Chelikowsky, M.L. Cohen. *Phys. Rev. B*, **14**, 556 (1976).

Редактор Л.В. Шаронова

Influence of the spin–orbit coupling on the electron ground-state structure in silicon nanocrystals

A.A. Konakov^{+,*}, N.V. Kurova⁺, V.A. Burdov⁺

⁺ University of Nizhny Novgorod,
603950 Nizhny Novgorod, Russia

^{*} Physical-Technical Research Institute,
University of Nizhny Novgorod,
603950 Nizhny Novgorod, Russia

Abstract An effect of the spin–orbit interaction on the ground-state structure in the conduction band of spherical silicon nanocrystals is investigated theoretically using the envelope-function approximation and the $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -method. It is shown that weak spin–orbit coupling of the conduction and valence bands leads to a specific asymmetric hybridization of the s - and p -type envelope functions with opposite spin orientation caused by anisotropy of the spin mixing in the conduction band of bulk silicon. As a result, the wave functions of the ground state are reconstructed while the ground-state energy insignificantly decreases. Note that the spin-mixing anisotropy in the nanocrystals substantially depends on their sizes due to the quantum confinement effect.