

Спиновая релаксация дырок в Ge квантовых точках

А. Ф. Зиновьева¹⁾, А. В. Ненашев, А. В. Двуреченский

Институт физики полупроводников СО РАН, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию July 4, 2005

Исследована спиновая релаксация дырки в изолированной Ge квантовой точке за счёт взаимодействия с фононами. Механизм спиновой релаксации в данном случае состоит в модуляции спин-орбитального взаимодействия колебаниями решётки. Согласно проведенным расчётам время спиновой релаксации за счёт прямых однофононных процессов для основного дырочного состояния составляет 1.4 миллисекунды в магнитном поле $H=1$ Тл, при температуре $T = 4$ К. Зависимость времени релаксации от магнитного поля описывается степенной функцией H^{-5} . При более высоких температурах существенный вклад в спиновую релаксацию вносят двухфононные (рамановские) процессы. За счёт этого время спиновой релаксации уменьшается до наносекунд при повышении температуры до $T = 20$ К. На основе анализа вероятностей переходов сделан вывод, что основную роль в рамановских процессах играет третье и двенадцатое возбужденные дырочные состояния, которые являются промежуточными в двухступенчатых процессах релаксации.

PACS: 72.25.Rb, 73.21.La, 71.70.Ej

Спиновые явления в наноструктурах в настоящее время рассматриваются как одно из актуальных направлений современной физики твёрдого тела. Это направление получило отдельное название "спинтроника", что связано с потенциальным применением спиновой степени свободы для квантовых вычислений и для создания устройств хранения информации. Гетероструктуры на основе Ge/Si материалов являются наиболее перспективными для использования спиновой степени свободы, поскольку время спинрешеточной релаксации T_1 в Si составляет 1-10 часов при гелиевых температурах [1], а время дефазировки T_2 составляет миллисекунды [2]. В Ge при тех же температурах времена T_1 , T_2 одного порядка и составляют миллисекунды [3].

Квантовые точки Ge/Si формируются в процессе гетероэпитаксии Ge на подложке Si, когда в определенных условиях происходит переход от двумерно-слоевого механизма роста Ge пленки к трёхмерному росту. Характерные размеры островков составляют 10-20 нм, высота 1-2 нм, таким образом, поведение носителей заряда в этих островках определяется квантово-размерными эффектами [4]. Существующий разрыв энергетических зон и деформационные эффекты приводят к формированию потенциальной

ямы в Ge для дырок. Недавние исследования показали, что с понижением размерности системы время спиновой релаксации увеличивается [5, 6]. Дело в том, что в низкоразмерных системах при замораживании степеней свободы менее эффективными становятся механизмы, связанные с рассеянием квазиимпульса. Так, например, при переходе к двумерным системам механизм Дьяконова-Переля становится менее эффективным. При дальнейшем понижении размерности вплоть до нульмерных объектов происходит дальнейшее увеличение времени спиновой релаксации. Возможность сохранения спиновой ориентации длительное время актуальна для создания приборов, использующих спиновую степень свободы. На данный момент предложены схемы реализаций квантовых вычислений на квантовых точках [7] и такие приборы как спиновые транзисторы, спиновые фильтры на квантовых точках [8].

В данной работе представлены результаты вычислений времени спиновой релаксации за счет взаимодействия с фононами для дырочных состояний в изолированной Ge квантовой точке в магнитном поле. Кроме фононов, причиной переворота спина может служить магнитное поле, создаваемое ядрными спинами [9, 10], а также процессы, происходящие при туннелировании дырки из одной квантовой точки в другую [11]. Существуют, однако, условия, при которых фононный механизм релаксации спина преобладает. Процессы туннелирования могут давать вклад в релаксацию спина только в достаточно плотных массивах квантовых точек, и только для носи-

¹⁾ aigul@isp.nsc.ru

телей с энергией, близкой к уровню Ферми. Взаимодействие со спинами ядер (сверхтонкое взаимодействие) становится определяющим только в том случае, когда внешнее магнитное поле достаточно мало по сравнению с полем ядерных спинов. Для оценки можно воспользоваться экспериментальными данными по квантовым точкам InP [12], в которых эффект дефазировки спинов электронов ядерными спинами подавляется во внешнем магнитном поле > 0.1 Тл. Для Ge/Si точек эту величину можно рассматривать как оценку сверху, т. к. ядерные моменты In и P значительно больше ядерных моментов Ge и Si [13].

Природа спиновой релаксации за счет взаимодействия с фононами заключается в том, что колебания решетки приводят к модуляции спин-орбитального взаимодействия. Спин-орбитальное взаимодействие становится зависимым от времени, что в конечном итоге приводит к спиновой релаксации. Спин-орбитальное взаимодействие играет значительную роль при формировании структуры валентной зоны и в спиновой релаксации дырок в объёмных полупроводниках. Величина спин-орбитального взаимодействия в Ge (~ 0.3 eV) сравнима с энергией квантования в Ge квантовой точке. Поэтому оно существенно влияет на электронную структуру в Ge квантовой точке. На основании этого мы полагаем, что в изолированной Ge квантовой точке при ненулевых температурах данный механизм спиновой релаксации будет основным.

В расчеты была заложена конкретная геометрия квантовой точки: пирамида с квадратным основанием, высотой в 10 раз меньшей стороны основания. Выбор геометрии основан на данных исследований с помощью сканирующей туннельной микроскопии (СТМ) и просвечивающей электронной микроскопии (ПЭМ) высокого разрешения [14]. Задача решалась в рамках метода сильной связи и во многом базируется на наших предыдущих исследованиях электронного спектра в Ge квантовых точках [15, 16, 17].

На первом этапе мы рассмотрели спиновую релаксацию за счет однофононных прямых процессов (первый порядок теории возмущений). Следуя подходу, развитому в работе Рот [18] для расчета времени спин-решеточной релаксации, мы вычисляем новые волновые функции зеемановских подуровней в магнитном поле, а затем находим матричный элемент перехода между ними за счет взаимодействия с фононами. Мы рассматриваем процессы при низких температурах ($T < 40$ К), поэтому учитываем только акустические фононы. Вклад оптических фононов подавлен бoльцмановской экспонентой $\exp(-E_{ph}/kT)$, где E_{ph} – энергия оптического фоно-

на. Оператор взаимодействия с акустическими фононами описывается формулой:

$$H_{m'm}^\varepsilon = \sum_{ij} D_{m'm}^{ij} \varepsilon_{ij},$$

где $D_{m'm}^{ij}$ – тензор потенциала деформации, константы деформационного потенциала D определяют также и изменение спектра при однородной деформации, индексы m, m' пробегают по энергетическим зонам. Тензор деформации ε_{ij} определяется как:

$$\varepsilon_{ij} = \sum_{\mathbf{q}} i \left(\frac{\hbar}{2\rho\omega_{\mathbf{q}}} \right)^{1/2} \frac{1}{2} [q_i(e_{\mathbf{q}})_j + q_j(e_{\mathbf{q}})_i] \times \\ \times (e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} a_{\mathbf{q}} - e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} a_{\mathbf{q}}^+),$$

где ρ – плотность среды, $e_{\mathbf{q}}$ – вектор поляризации фонона, \mathbf{q} – волновой вектор фонона, $a_{\mathbf{q}}^+, a_{\mathbf{q}}$ – операторы рождения и уничтожения фононов. Мы использовали стандартную форму оператора электрон-фононного взаимодействия для состояний в валентной зоне [19].

Мы предполагаем что носитель остается в состоянии с той же пространственной конфигурацией, только переворачивает спин, испуская фонон. Матричный элемент перехода между состояниями со спином вверх $|\uparrow\rangle$ и спином вниз $|\downarrow\rangle$

$$M_{\mathbf{q}} = \frac{i}{2} \left(\frac{\hbar(n_{\mathbf{q}} + 1)}{2\rho\omega_{\mathbf{q}}} \right)^{1/2} \langle \uparrow | D^{ij} | \downarrow \rangle (q_i(e_{\mathbf{q}})_j + q_j(e_{\mathbf{q}})_i), \quad (1)$$

где $n_{\mathbf{q}}$ – числа заполнения фононов, $\omega_{\mathbf{q}}$ – энергия фононов. В формуле (1) мы положили экспоненциальный множитель $e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}}$ равным 1, поскольку рассматриваем только длинноволновые фононы, для которых выполняется $ql \ll 1$, где l – характерный размер области локализации волновой функции дырки в квантовой точке.

Вероятность перехода между состояниями со спином вверх $|\uparrow\rangle$ и спином вниз $|\downarrow\rangle$ определяется золотым правилом Ферми:

$$\Gamma^{(1)} = \sum_{\mathbf{q}, e_{\mathbf{q}}} \frac{2\pi}{\hbar} |M_{\mathbf{q}}|^2 \delta(\hbar s q - \Delta E_z), \quad (2)$$

здесь ΔE_z – энергия зеемановского расщепления, s – скорость звука, принят линейный закон дисперсии для фононов. Подставив выражение (1) для матричного элемента перехода $M_{\mathbf{q}}$ в выражение (2), получаем:

$$\Gamma^{(1)} = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{\hbar}{2\rho\omega_{\mathbf{q}}} \frac{(n_{\mathbf{q}} + 1)}{(2\pi)^3} \langle D_{\Omega}^2 \rangle \int q^4 \delta(\hbar s q - \Delta E_z) dq, \quad (3)$$

где величина

$$\langle |D_{\Omega}|^2 \rangle = \frac{1}{4\pi} \int |\langle \uparrow | D^{ij} | \downarrow \rangle|^2 (n_i(e_{\mathbf{q}})_j + n_j(e_{\mathbf{q}})_i)^2 d\Omega,$$

получена при интегрировании по всем направлениям единичного вектора \mathbf{n} .

Для того, чтобы выяснить функциональную зависимость вероятности перехода от магнитного поля мы упростили формулу (3) в пределе низких температур ($kT \ll \Delta E_z$) до следующей:

$$\Gamma^{(1)} = \frac{1}{2\pi} \frac{\langle |D_{\Omega}|^2 \rangle q_0^4}{\rho \omega_{\mathbf{q}} \hbar s} = \frac{\langle |D_{\Omega}|^2 \rangle \Delta E_z^3}{2\pi \rho s^5 \hbar^4}, \quad (4)$$

где $q_0 = \Delta E_z / \hbar s$.

На первый взгляд формула (4) демонстрирует третий порядок степенной зависимости от магнитного поля, но в матричном элементе $\langle |D_{\Omega}|^2 \rangle$ скрыта квадратичная зависимость, поскольку изменение волновых функций $\delta\psi$ линейно зависит от магнитного поля (вплоть до полей $H \sim 10$ Тл),

$$\psi = \psi_0 + \delta\psi(H).$$

Таким образом, зависимость темпа спиновой релаксации от магнитного поля описывается степенной функцией $\Gamma \sim H^5$. Расчеты по формуле (2) в магнитном поле $H = 1$ Тл при температуре $T = 4$ К дали значение времени спиновой релаксации для основного состояния $\tau = 1.4$ мс. Магнитное поле направлено вдоль оси симметрии квантовой точки Z ($H \parallel Z$). Для вычисления зеемановского расщепления ΔE_z было использовано значение g -фактора, полученное в работе [15].

Температурная зависимость времени релаксации за счёт однофононных процессов имеет следующий вид:

$$\tau(T) = const \cdot (2n_{\mathbf{q}} + 1)^{-1},$$

где $n_{\mathbf{q}}$ – число фононов в колебательной моде с энергией фонона ΔE_z . При $kT \gg \Delta E_z$ величина $n_{\mathbf{q}}$ пропорциональна температуре, а при $T \rightarrow 0$ $n_{\mathbf{q}}$ обращается в ноль. Таким образом, τ стремится к константе при $T \rightarrow 0$ (т. к. остаются только спонтанные переходы) и $\tau \sim T^{-1}$ при достаточно высоких температурах (что соответствует преобладанию вынужденных переходов).

Рассмотрим подробнее, как меняются волновые функции в магнитном поле. Волновые функции рассчитываются так же, как в работах [15, 16, 17], на основе метода сильной связи, только в гамильтониан был добавлен оператор взаимодействия с магнитным полем. Волновая функция основного состояния

дырки в Ge квантовой точке в нулевом магнитном поле согласно результатам расчетов формируется в основном из состояний зоны тяжелых дырок ($\sim 84\%$) и имеет малую добавку из состояний зоны легких дырок ($\sim 8\%$) и спин-отщепленной подзоны ($\sim 8\%$). Для дырочных состояний роль эффективного спина играет угловой момент \mathbf{J} . Разложение волновых функции зеемановских подуровней в базисе $|J, J_z\rangle$ показывает, что состояние $|\uparrow\rangle$ в основном формируется состояниями с $J_z = +3/2$ и с $J_z = -1/2$, а для состояния $|\downarrow\rangle$ ситуация обратная: здесь играют основную роль состояния с $J_z = -3/2$ и с $J_z = +1/2$. Поэтому удобно представить волновые функции зеемановских подуровней в следующем виде:

$$\begin{aligned} |\uparrow\rangle &= \alpha |3/2\rangle + \beta |-1/2\rangle, \\ |\downarrow\rangle &= \alpha |-3/2\rangle + \beta |1/2\rangle. \end{aligned}$$

Такое разложение показывает, что добавка состояний зоны легких дырок и спин-отщепленной подзоны с $J_z = 1/2$ имеет противоположный спин по отношению к основному вкладу состояний тяжелых дырок. Магнитное поле приводит к следующим изменениям волновых функций: для верхнего зеемановского подуровня увеличивается вклад состояний легкой дырки с противоположным направлением спина, вклад же тяжелой дырки уменьшается. Для нижнего зеемановского подуровня ситуация обратная: возрастает вклад состояний тяжелой дырки. Данные изменения волновых функций основного состояния в магнитном поле происходят за счет подмешивания возбужденных состояний дырки в Ge квантовой точке. Результаты расчетов показывают, что не все возбужденные состояния вносят эквивалентный вклад в изменение волновой функции основного состояния, $\delta\psi(H)$. Вклады первого и третьего возбужденных состояний в $\delta\psi(H)$ на порядок превышают вклады остальных состояний. На основе анализа вида волновых функций [15] получено, что главным фактором, определяющим величины вкладов возбужденных состояний, является симметрия волновых функций. Основное состояние формируется s -образной компонентой тяжелой дырки и имеет d -образную компоненту легкой дырки. К s -образному состоянию тяжелой дырки под действием магнитного поля подмешивается s -образное состояние компоненты легкой дырки третьего возбужденного уровня, поскольку симметрии этих состояний совпадают. А вот подмешивание p -образного состояния компоненты легкой дырки первого возбужденного уровня объясняется тем, что данное состояние в основном сконцентрировано в центре квантовой точки, как и основное состояние [15].

Нами были проанализированы вклады различных компонент тензора деформации в матричный элемент взаимодействия с фононами. Получено, что основной вклад в спиновую релаксацию дают следующие компоненты тензора деформации: ε_{xz} , ε_{yz} . Такие компоненты тензора деформации ответственны за перемешивание состояний зоны тяжелой дырки и зоны лёгкой дырки. Это позволило сделать вывод, что спиновая релаксация идет благодаря взаимному осциллирующему изменению вкладов состояний тяжелой дырки и лёгкой дырки, возбуждаемому фононной волной. Для возбужденных состояний вклад лёгкой дырки больше, чем для основного состояния, поэтому изменение, вносимое фононной волной больше. Соответственно, спиновая релаксация идет более интенсивно. Действительно расчеты для первого возбужденного состояния дают меньшее время спиновой релаксации, $\tau = 0.37$ нс.

На следующем этапе при вычислении времени спиновой релаксации для основного состояния были учтены двухфононные (рамановские) процессы. В этом случае процесс релаксации идет через промежуточное возбужденное состояние. Носитель совершает переход из основного состояния в возбужденное и в обратном направлении, что сопровождается поглощением фонона с частотой ω_q и испусканием фонона с частотой $\omega_{q'}$. Переворот спина может произойти на любом из двух этапов. Условие, обеспечивающее сохранение энергии записывается в виде $\omega_{q'} - \omega_q = \omega$, где $\hbar\omega = \Delta E_z$. Вероятность рамановских процессов определяется как:

$$\Gamma^{(2)} = \sum_{q, q', e_q, e_{q'}} \frac{2\pi}{\hbar} \left| \sum_j \frac{\langle f | H_\varepsilon(\omega_{q'}) | j \rangle \langle j | H_\varepsilon(\omega_q) | i \rangle}{E_i - E_j \mp \hbar\omega_q} \right|^2 \times \delta(E_f - E_i \pm \hbar\omega_q \mp \hbar\omega_{q'}),$$

здесь оператор H_ε описывает электрон-фононное взаимодействие, j – номер возбужденного состояния, суммирование ведется по волновым векторам и по их поляризациям.

При учете рамановских процессов зависимость от температуры становится более существенной. Если при температуре $T = 4$ К время спиновой релаксации для основного состояния дырки в Ge квантовой точке составляет 0.3 нс (магнитное поле $H = 1$ Тл), то при $T = 10$ К оно уже падает до 0.65 пс. При дальнейшем повышении температуры время спиновой релаксации продолжает уменьшаться и при 20 К составляет наносекунды. Зависимость темпа релаксации от температуры при учете двухфононных процессов описывается законом T^7 (см. рис. 1), в то время как релаксация за счет однофононных процессов

слабо зависит от температуры. На основе анализа вероятностей переходов сделан вывод, что основную роль в рамановских процессах играют третье и двенадцатое возбужденные состояния, которые и служат промежуточными в двухступенчатых процессах релаксации. Следует также отметить, что при температурах ниже некоторой критической прямые процессы становятся определяющими. Значение такой критической температуры для поля $H = 1$ Тл составляет 3 К.

В заключение сформулируем область применимости полученных результатов. Первое ограничение вытекает из условия: $\Delta E_z \ll E_0 - E_n$, то есть зеemannовское расщепление должно быть меньше расстояния между уровнями квантования. Это условие хорошо выполняется для магнитных полей $H \sim 10$ Тл. Второе ограничение вытекает из условия $\lambda \gg l$, где l – характерный размер области локализации волновой функции дырки, λ – длина волны фонона. Поскольку согласно нашим расчетам [11] область локализации $l \approx 3$ нм, то это соответствует ограничению по температуре $T < 70$ К. И последнее ограничение связано с требованием малости следующих порядков теории возмущений. Мы рассмотрели первые два порядка теории возмущений и получили соответствующие темпы релаксации $\Gamma^{(1)}$ и $\Gamma^{(2)}$. Из соображений размерности можно записать соотношение для темпа релаксации в следующем порядке теории возмущений $\Gamma^{(3)}$:

$$\frac{\Gamma^{(3)}}{\Gamma^{(2)}} \sim \left(\frac{|M^{(3)}|}{|M^{(2)}|} \right)^2 \cdot \frac{(kT)^4}{\rho s^5 \hbar^3}.$$

Из условия малости данного отношения находим ограничение по температуре: $T < 60$ К.

Таким образом, данный подход для расчета темпа спиновой релаксации справедлив для температур $T < 60$ К и магнитных полей вплоть до $H \sim 10$ Тл. Длительное время релаксации за счет прямых процессов, полученное в данной работе ($\tau \sim 1$ нс), является прямым следствием того, что характер основного состояния дырки в квантовой точке близок к состоянию тяжелой дырки. Возможность релаксации зависит от степени подмешивания состояний легкой дырки, и поскольку эта величина мала, то спиновая релаксация подавлена.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (проект 05-02-16285) и INTAS (грант 2001-0615).

1. G. Feher, Phys. Rev. **114**, 1219 (1959); G. Feher and E. Gere, **114**, 1245 (1959); D. K. Wilson and G. Feher, **124**, 1068 (1961).

2. M. Chiba and A. Hirai, J. Phys. Soc. Jpn. **33**, 730 (1972).
3. R. Vrijen, E. Yablonovitch, K. Wang, H. W. Jiang, A. Balandin, V. Roychowdhury, T. Mor, D. DiVincenzo, Phys. Rev. A **62**, 012306.
4. A. I. Yakimov, A. V. Dvurechenskii, A. I. Nikiforov and O. P. Pcheljakov, Thin. Solid Films **336**, 332, (1998).
5. N. S. Averkiev, L. E. Golub, M. Willander, Физика и техника полупроводников **36**, 1, 97 (2001).
6. N. S. Averkiev and L. E. Golub, Phys. Rev. B **60**, 23, 15582 (1999).
7. D. Loss and D. DiVincenzo, Phys. Rev. A **57**, 1, 120 (1998).
8. P. Recher, E. V. Sukhorukov and D. Loss, Phys. Rev. Lett. **85**, 1962 (2000).
9. I. A. Merkulov, A. L. Efros and M. Rosen, Phys. Rev. B **65**, 205309 (2002).
10. A. V. Khaetskii, D. Loss and L. Glazman, Phys. Rev. Lett. **88**, 186802 (2002).
11. A. F. Zinovieva, A. V. Nenashev, A. V. Dvurechenskii, Phys. Rev. B **71**, 033310 (2005).
12. P.-F. Braun *et al.*, Proc. of 13th Int. Symp. "Nanostructures: Physics and Technology", St Petersburg, 2005, p. 45.
13. А. Лёше, *Ядерная индукция*, Наука, Москва (1963), с. 477.
14. A. I. Yakimov, A. V. Dvurechenskii, Yu. Yu. Proskuryakov, A. I. Nikiforov, O. P. Pchelyakov, A. S. Teys and A. K. Gutakovskii, Appl. Phys. Lett. **75**, 1413 (1999).
15. A. V. Nenashev, A. V. Dvurechenskii, A. F. Zinovieva, Phys. Rev. B **67**, 205301 (2003).
16. А. В. Ненашев, А. В. Двуреченский, А. Ф. Зиновьева, ЖЭТФ **123**, 2, 362 (2003).
17. A. V. Dvurechenskii, A. V. Nenashev, A. I. Yakimov, Nanotechnology **13**, 75, (2002).
18. L. M. Roth, Phys. Rev. B **118**, 6, 1534 (1960).
19. Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус, *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках*, Наука, Москва (1972), с. 393.

Рис.1. Температурная зависимость времени спиновой релаксации за счет взаимодействия с фононами для основного состояния дырки в Ge квантовой точке (высота $h=1.5$ нм, размер основания $l=15$ нм). Магнитное поле $H \parallel Z$, где Z – направление роста Ge квантовой точки.

