

МЕХАНИЗМ СПИНОВОЙ РЕЛАКСАЦИИ ПРИ ПРЫЖКОВОМ ТРАНСПОРТЕ В ДВУМЕРНОМ МАССИВЕ АСИММЕТРИЧНЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧЕК

*А. Ф. Зиновьева**, *А. В. Ненашев*, *А. В. Двуреченский*

*Институт физики полупроводников Сибирского отделения Российской академии наук
630090, Новосибирск, Россия*

Поступила в редакцию 11 декабря 2006 г.

Исследована спиновая релаксация в режиме прыжковой проводимости в двумерных массивах квантовых точек, обладающих структурной асимметрией. Показано, что отсутствие симметрии «верх–низ» у квантовой точки приводит к появлению нового механизма спиновой релаксации при туннелировании в двумерном массиве квантовых точек. На основе теоретического анализа элементарного события — прыжка между двумя туннельно-связанными точками — продемонстрировано различие механизмов спиновой релаксации для симметричных и асимметричных квантовых точек. Показано, что переворот спина при туннелировании между квантовыми точками является основным механизмом спиновой релаксации при транспорте в плотных массивах квантовых точек Ge в малых (1–10 Тл) магнитных полях.

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

1. ВВЕДЕНИЕ

Проблема передачи и хранения спиновой информации в полупроводниковых наноструктурах остается актуальной в связи с многочисленными предложениями создания приборов и логических схем, использующих спиновую степень свободы [1–4]. Одним из привлекательных с этой точки зрения объектов является спин носителя, локализованного в квантовой точке. Спин в квантовой точке интересует исследователей, во-первых, с точки зрения возможности сохранения длительное время спиновой информации, а во-вторых, относительной легкости управления спином отдельного носителя. Одним из способов создания квантовых точек является самоорганизация в процессе гетероэпитаксии материалов с различными постоянными решетки. Таким методом можно создавать массивы квантовых точек высокой плотности (около 10^{11} – 10^{12} см⁻²) и однородности около 10–20% [5]. В настоящее время ведутся работы по созданию упорядоченных массивов квантовых точек и достигнуты определенные успехи в этом направлении [6, 7]. Перенос заряда в плотных массивах квантовых точек происходит в режиме прыжковой

проводимости. Поэтому становится актуальным изучение спиновой релаксации в процессе прыжковой проводимости. Недавно появились работы по данному вопросу для полупроводников с отсутствием центра симметрии [8, 9], например GaAs. В работах высказывается идея определяющей роли механизма Дьяконова–Переля не только для спиновой релаксации свободных электронов в зоне проводимости, но и для локализованных на примесях электронов, участвующих в прыжковой проводимости. В полупроводниковых системах, обладающих центром инверсии, таких как Ge или Si, механизм Дьяконова–Переля не работает. Но если система обладает структурной асимметрией, то включаются механизмы спиновой релаксации за счет спин-орбитального взаимодействия, например, для двумерных систем за счет взаимодействия Бычкова–Рашба [10]. В работе [11] было показано, что при резонансном туннелировании между квантовыми точками, обладающими структурной асимметрией, спин носителя поворачивается вокруг эффективного магнитного поля, направление которого зависит от направления туннелирования. Этот механизм является прямым следствием геометрии квантовых точек, представляющих собой нанокластеры пирамидальной формы.

*E-mail: aigul@isp.nsc.ru

В данном случае существенно отсутствие симметрии «верх–низ» у квантовой точки. Целью данной работы является исследование спиновой релаксации при прыжковом транспорте в массивах квантовых точек, обладающих структурной асимметрией. В работе изложен теоретический подход и проведены вычисления для характерных параметров типичного массива квантовых точек Ge/Si.

2. ТЕОРЕТИЧЕСКИЙ ПОДХОД

2.1. Спиновая релаксация при прыжковом транспорте

Объектом исследования настоящей работы является двумерный слой квантовых точек, сформированных в результате самоорганизации при гетероэпитаксии. Существующий в реальных массивах квантовых точек разброс по размерам приводит к разбросу по энергиям локализованных состояний. При конечных температурах перенос заряда в массиве происходит в результате прыжков носителей с одной квантовой точки на другую. Благодаря существованию отличного от нуля перекрытия экспоненциальных хвостов волновых функций вероятность перехода (прыжка) между квантовыми точками имеет конечное значение:

$$\Gamma = \left(\frac{2\pi}{\hbar}\right) \left(\frac{V}{8\pi^3}\right) F(n_{\mathbf{q}}, N_i, N_j) \times \int |\langle H' \rangle|^2 \delta(\hbar s q - \Delta) d\mathbf{q}.$$

Здесь Δ — разница энергий двух туннельно-связанных квантовых точек, V — объем элементарной ячейки, s — скорость звука, а матричный элемент равен

$$\langle H' \rangle = \langle \Psi_j | \hat{H}_\varepsilon | \Psi_i \rangle.$$

Здесь \hat{H}_ε — оператор электрон-фононного взаимодействия.

Функция $F(n_{\mathbf{q}}, N_i, N_j)$ описывает все статистические факторы, от которых зависит переход: i -й центр должен быть заполнен, j -й центр должен быть пуст, в системе должен существовать фонон с нужной энергией, N_i, N_j — вероятности заполнения i -й и j -й точек, $n_{\mathbf{q}}$ — среднее число фононов в состоянии с импульсом \mathbf{q} . Мы будем рассматривать случай достаточно низких температур, поэтому будем учитывать только акустические фононы.

Оператор взаимодействия с акустическими фононами описывается формулой

$$H_\varepsilon = \sum_{\alpha\beta} D^{\alpha\beta} \varepsilon_{\alpha\beta},$$

где $D^{\alpha\beta}$ — тензор потенциала деформации, компоненты тензора деформации выражаются так:

$$\varepsilon_{\alpha\beta} = \sum_{\mathbf{q}} i \sqrt{\frac{\hbar}{2\rho\omega_{\mathbf{q}}}} \times \frac{1}{2} (q_\alpha (e_{\mathbf{q}})_\beta + q_\beta (e_{\mathbf{q}})_\alpha) (e^{i\mathbf{q}r} a_{\mathbf{q}} - e^{-i\mathbf{q}r} a_{\mathbf{q}}^\dagger),$$

где ρ — плотность материала, $\mathbf{e}_{\mathbf{q}}$ — вектор поляризации фонона, \mathbf{q} — волновой вектор фонона, $a_{\mathbf{q}}^\dagger$ и $a_{\mathbf{q}}$ — операторы рождения и уничтожения фононов.

С учетом туннельной связи волновые функции имеют вид

$$\Psi_i = \psi_i + A_t \psi_j,$$

$$\Psi_j = \psi_j - A_t \psi_i,$$

где коэффициент туннельной связи $A_t \sim I_{ij}/\Delta$, здесь I_{ij} — интеграл перекрытия.

Существуют две возможности переверота спина при туннелировании: 1) переверот спина за счет взаимодействия с фононами в ненулевом магнитном поле и 2) переход в состояние с противоположным спином непосредственно при туннелировании. Первый случай — это традиционный механизм переверота спина, описанный в работе [12]. Здесь за счет внешнего магнитного поля в волновой функции появляется добавка состояния с противоположным спином и это приводит к ненулевому матричному элементу электрон-фононного взаимодействия между состояниями с противоположными спинами.

Второй случай мы разберем в данной работе. В этом случае структурная асимметрия квантовой точки приводит к существованию эффективно магнитного поля, которое вызывает отклонение среднего значения спина на хвостах волновой функции от направления спина в области преимущественной локализации волновой функции [11].

Для прыжка с переверотом спина важно учесть добавку к волновой функции состояния с противоположным спином на соседней точке:

$$\Psi_i^\downarrow = \psi_i^\downarrow + A \psi_j^\uparrow,$$

$$\Psi_j^\uparrow = \psi_j^\uparrow - A \psi_i^\downarrow,$$

где $A \sim I_{ij}^{\downarrow\uparrow}/\Delta$, $I_{ij}^{\downarrow\uparrow}$ — интеграл перекрытия между состояниями с противоположными спинами в i -й и j -й квантовых точках.

Для определения вероятности прыжка с переворотом спина необходимо вычислить матричный элемент $\langle H' \rangle = \langle \Psi_j | \hat{H}_\varepsilon | \Psi_i \rangle$. Распишем, что представляет собой матричный элемент для процесса с поглощением фонона:

$$\langle H' \rangle = C \left[\left(\psi_j^\uparrow, \tilde{H}_\varepsilon e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \psi_j^\uparrow \right) - \left(\psi_i^\downarrow, \tilde{H}_\varepsilon e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \psi_i^\downarrow \right) \right],$$

где

$$C = \frac{i}{2} \left(\frac{\hbar n_q}{2\rho_0 V \omega_q} \right)^{1/2} \left(\frac{I_{\uparrow\downarrow}}{\Delta} \right),$$

$$\tilde{H}_\varepsilon = \sum_{ij} D^{ij} (q_i (e_{\mathbf{q}})_j + q_j (e_{\mathbf{q}})_i).$$

Примем, что $\psi_j(r - R) = \psi_i(r)$, где R — среднее расстояние между центрами, тогда

$$\begin{aligned} \langle H' \rangle &= C \left[\left(\psi_j^\uparrow, \tilde{H}_\varepsilon e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \psi_j^\uparrow \right) - \left(\psi_i^\downarrow, \tilde{H}_\varepsilon e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \psi_i^\downarrow \right) \right] = \\ &= C (e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}} - 1) \left(\psi_i^\downarrow, \tilde{H}_\varepsilon e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \psi_i^\downarrow \right). \end{aligned}$$

Экспоненциальный множитель $e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}$ можно положить равным единице, если рассматривать только длинноволновые фононы с длиной волны $\lambda \gg l$, где l — характерный размер области локализации волновой функции дырки в квантовой точке. Это накладывает ограничение по температуре $T < 70$ К, если взять $l \approx 3$ нм, согласно результатам численных расчетов [13].

Квадрат матричного элемента содержит осциллирующую часть $\cos \mathbf{q} \cdot \mathbf{R}$:

$$|\langle H' \rangle|^2 = C^2 (1 - \cos \mathbf{q} \cdot \mathbf{R}) \left(\psi_i^\downarrow, \tilde{H}_\varepsilon \psi_i^\downarrow \right)^2.$$

Поскольку эта часть знакопеременна, она не вносит существенного вклада в результирующий темп релаксации, и мы ею пренебрегаем.

В результате для перехода из i -го центра в j -й получаем

$$\begin{aligned} \Gamma_1 &= \left(\frac{I_{ij}^{\uparrow\downarrow}}{\Delta} \right)^2 \langle D_\Omega^2 \rangle_{\uparrow\uparrow} F(n_q, N_i, N_j) \times \\ &\times \int q^3 \delta(\hbar s q - \Delta) d\mathbf{q}, \quad (1) \end{aligned}$$

где величина

$$\begin{aligned} \langle |D_\Omega|^2 \rangle_{\uparrow\uparrow} &= \frac{1}{4\pi} \times \\ &\times \int |\langle \psi_i^\uparrow | D^{ij} | \psi_i^\uparrow \rangle|^2 (n_\alpha (e_{\mathbf{q}})_\beta + n_\beta (e_{\mathbf{q}})_\alpha)^2 d\Omega \end{aligned}$$

содержит матричный элемент деформационного потенциала между состояниями с одинаковой ориентацией спина.

Сравним полученное выражение со случаем квантовых точек, не обладающих структурной асимметрией. В этом случае отклонения среднего значения спина на хвостах волновой функции не происходит, так как нет эффективного магнитного поля. В данном случае сам процесс туннелирования не влияет на ориентацию спина, носитель остается в том же спиновом состоянии. Переворот спина может происходить только в ненулевом магнитном поле по механизму, описанному в работе [12]. Волновые функции будут иметь вид

$$\Psi_i^\downarrow = \psi_i^\downarrow + \tilde{A} \psi_j^\downarrow,$$

$$\Psi_j^\uparrow = \psi_j^\uparrow - \tilde{A} \psi_i^\uparrow,$$

где коэффициент туннельной связи $\tilde{A} \approx I_{ij}^{\uparrow\uparrow}/\Delta$, здесь $I_{ij}^{\uparrow\uparrow}$ — обычный интеграл перекрытия без учета спинового состояния.

Внешнее магнитное поле индуцирует подмешивание возбужденных состояний $|\Psi_n\rangle$:

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= |\Psi_0\rangle + \sum_{exc} |\Psi_{exc}\rangle \frac{\langle \Psi_{exc} | H_{mag} | \Psi_0 \rangle}{E_0 - E_{exc}} = \\ &= |\Psi_0\rangle + \sum_n \alpha_n(H) |\Psi_n\rangle \end{aligned}$$

и за счет этого в волновой функции состояния со спином вверх появляется добавка состояния с противоположным спином и наоборот. Тогда матричный элемент электрон-фононного взаимодействия между волновыми функциями с различной спиновой ориентацией отличен от нуля:

$$\langle H' \rangle = \tilde{A} \left(\left(\psi_j^\downarrow, \hat{H}_\varepsilon \psi_j^\uparrow \right) - \left(\psi_i^\uparrow, \hat{H}_\varepsilon \psi_i^\downarrow \right) \right),$$

откуда

$$|\langle H' \rangle|^2 = \tilde{C}^2 (1 - \cos \mathbf{q} \cdot \mathbf{R}) \left(\psi_i^\downarrow, \tilde{H}_\varepsilon \psi_i^\downarrow \right)^2,$$

где \tilde{C}^2 содержит \tilde{A}^2 .

Из этого выражения ясно, что вычисление вероятности переворота спина при туннелировании сводится к вычислению матричного элемента $\langle \psi_i^\uparrow | H_\varepsilon | \psi_i^\downarrow \rangle$ внутри одного центра и коэффициента туннельной связи между центрами. Таким образом, вероятность переворота спина при переходе между симметричными точками определяется следующим выражением:

$$\begin{aligned} \Gamma_2 &= \left(\frac{I_{ij}^{\uparrow\uparrow}}{\Delta} \right)^2 \langle D_\Omega^2 \rangle_{\uparrow\downarrow} F(n_q, N_i, N_j) \times \\ &\times \int q^3 \delta(\hbar s q - \Delta) d\mathbf{q}, \quad (2) \end{aligned}$$

где величина

$$\langle |D_{\Omega}|^2 \rangle_{\uparrow\downarrow} = \frac{1}{4\pi} \times \int |\langle \psi_i^{\uparrow} | D^{ij} | \psi_i^{\downarrow} \rangle|^2 (n_{\alpha}(e_q)_{\beta} + n_{\beta}(e_q)_{\alpha})^2 d\Omega$$

содержит матричный элемент деформационного потенциала между состояниями с противоположной ориентацией спина.

Таким образом, выражения (1) и (2) аналогичны по своей структуре, различие заключается в интегралах перекрытия $I_{ij}^{\uparrow\downarrow}$ и $I_{ij}^{\uparrow\uparrow}$ и в матричных элементах $\langle |D_{\Omega}|^2 \rangle_{\uparrow\uparrow}$ и $\langle |D_{\Omega}|^2 \rangle_{\uparrow\downarrow}$.

Интеграл перекрытия $I_{ij}^{\uparrow\downarrow}$ по сути определяет вероятность переворота спина при резонансном туннелировании без участия фононов [11]:

$$W_{ij}^{\uparrow\downarrow} = \frac{2\pi}{\hbar} |I_{ij}^{\uparrow\downarrow}|^2 \delta(\varepsilon_i - \varepsilon_j).$$

Здесь $\varepsilon_i, \varepsilon_j$ — энергии дырок в i -й и j -й квантовых точках. Далее мы рассмотрим подробно случай резонансного туннелирования между квантовыми точками, чтобы определить интеграл перекрытия $I_{ij}^{\uparrow\downarrow}$.

2.2. Спиновая релаксация при резонансном туннелировании

Переворот спина при резонансном туннелировании носителя между двумя туннельно-связанными квантовыми точками является базовым элементарным событием, лежащим в основе спиновой релаксации при прыжковом транспорте по массиву квантовых точек. Резонансное туннелирование для квантовых точек Ge было рассмотрено в работе [11]. Для полноты изложения мы кратко опишем суть данной работы.

Для нахождения интеграла перекрытия был рассмотрен бесконечный одномерный кристалл, построенный из одинаковых квантовых точек Ge. Ширина зоны такого кристалла определяется интегралом перекрытия. Поэтому, вычислив энергетический спектр такого кристалла, можно получить интеграл перекрытия. Эта задача была решена путем нахождения собственных значений для модельной структуры, представляющей собой кремниевый параллелепипед со встроенной внутрь квантовой точкой Ge с периодическими граничными условиями (см. рис. 1). Интеграл перекрытия между состояниями с одинаковой ориентацией спина определяется как

$$I_{\pm}(d) = |E_+ - E_-|/4.$$

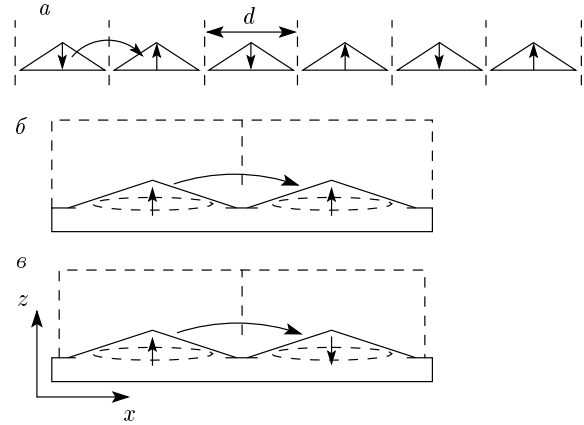


Рис. 1. а) Схематическое представление одномерного кристалла, атомами которого служат квантовые точки Ge. б, в — Схематическое представление двух типов туннельных процессов: б) туннелирование без переворота спина, в) туннелирование с переворотом спина

Здесь E_+ и E_- — энергии связывающего и антисвязывающего состояний.

Для туннелирования с переворотом спина было использовано граничное условие

$$\psi(-d/2, y, z) = \hat{K}\psi(d/2, y, z), \quad (3)$$

где \hat{K} — оператор крамерсовского сопряжения. Данное условие означает, что при переходе в соседнюю ячейку кристалла волновая функция трансформируется в крамерсовски-сопряженную волновую функцию.

Задача с таким граничным условием имеет такое же решение, как и задача с граничным условием $\psi(-d/2, y, z) = i\psi(d/2, y, z)$, что соответствует квазиимпульсу $k = k_{max}/2$ или $k = \pi d/2$ в зоне Бриллюэна рассматриваемого одномерного кристалла из квантовых точек Ge (доказательство в работе [11]). В случае кристаллов без центра инверсии эта точка соответствует максимальному спиновому расщеплению при $k \neq 0$. Спиновое расщепление в точке $k = k_{max}/2$ связано с отсутствием пространственной симметрии, здесь двукратное крамерсовское вырождение снимается и состояние с противоположным спином имеет противоположный квазиимпульс $k = -k_{max}/2$.

Таким образом, решение задачи с граничным условием (3) дает значение интеграла перекрытия $I_{\uparrow\downarrow}(d) = |E_1 - E_2|/4$, здесь E_1 и E_2 — собственные значения этой задачи. Интеграл перекрытия в данном случае связан со спиновым расщеплением.

Данное спиновое расщепление эквивалентно существованию некоторого эффективного магнитного поля, зависящего от направления и величины квазиимпульса k . Такое рассмотрение принято в кристаллах без центра инверсии, типа GaAs [14]. Там появление эффективного магнитного поля связывается с объемной асимметрией кристалла — отсутствием центра инверсии. В искусственном одномерном кристалле, построенном из одинаковых квантовых точек Ge, также отсутствует центр симметрии. Главная причина этого — отсутствие симметрии «верх–низ» у квантовой точки Ge.

Итак, главной причиной переворота спина является структурная асимметрия нанокластера Ge (SIA — structure inversion asymmetry). Спин-орбитальное взаимодействие в данной системе эквивалентно существованию некоторого эффективного магнитного поля, так называемого SIA-поля, разориентирующего спин.

Обнаруженный эффект проявляется довольно сильно, в первую очередь, потому, что в качестве объекта исследования были взяты квантовые точки Ge. Дело в том, что в квантовых точках Ge локализируются дырки, т. е. состояние в квантовой точке сформировано из состояний валентной зоны, где влияние спин-орбитального взаимодействия велико. Второй фактор — величина спин-орбитального взаимодействия (около 0.3 эВ в Ge), которая сравнима с энергией размерного квантования в квантовых точках Ge достаточно малых размеров (около 10–20 нм).

2.3. Спин-орбитальное взаимодействие в асимметричных структурах

В основе явления лежат два фактора: спин-орбитальное взаимодействие и структурная асимметрия. Поэтому представляет интерес проанализировать особенность спин-орбитального взаимодействия, характерную именно для асимметричных структур. Для этого воспользуемся предложенным в работе [11] рассмотрением простейших модельных структур — симметричных и асимметричных молекул (рис. 2). В данной работе была решена задача на собственные значения и найдены волновые функции для основного дырочного состояния в этих структурах в двухцентровом приближении в модели сильной связи. Спин-орбитальное взаимодействие было включено в рассмотрение, так же как и в работе [15]:

$$\hat{H}_{so} = \sum_i \hat{H}_{so}^{(i)}, \quad \hat{H}_{so}^{(i)} = \frac{2\Delta_{so}}{3} \hat{\mathbf{l}}_i \hat{\mathbf{s}}_i, \quad (4)$$

суммирование ведется по всем атомам, $\hat{\mathbf{l}}$ — оператор орбитального момента, $\hat{\mathbf{s}} = \hat{\boldsymbol{\sigma}}/2$ — оператор спина, Δ_{so} — величина спин-орбитального расщепления в валентной зоне. Для определенности рассматривалось состояние со спином вверх. Были рассчитаны спиновая плотность и ее распределение на каждом атоме, а точнее, построен вектор с компонентами $\langle \psi | \hat{J}_x | \psi \rangle$, $\langle \psi | \hat{J}_y | \psi \rangle$, $\langle \psi | \hat{J}_z | \psi \rangle$. Было установлено, что отсутствие симметрии «верх–низ» ведет к отклонению эффективного спина дырки от направления z (рис. 2а,б), а в симметричных молекулах (рис. 2в,г) такого отклонения не наблюдается. Аналогичный результат получится, если построить распределение спиновой плотности для типичной квантовой точки Ge с размерами $l = 15$ нм, $h = 1.5$ нм. На рис. 3 видно, что отсутствие симметрии «верх–низ» ведет к отклонению эффективного спина от оси z , так же как и в молекулах.

Данное рассмотрение демонстрирует, что микроскопическое расположение атомов является определяющим для появления SIA-поля. Асимметричное расположение атомов приводит к особому виду спин-орбитального взаимодействия, разориентирующего спин.

В рамках модели сильной связи спин-орбитальное взаимодействие записывается как

$$\hat{H}_{so} = A \hat{\mathbf{l}} \hat{\mathbf{s}},$$

где $\hat{\mathbf{l}}$ — орбитальный момент, а $\hat{\mathbf{s}}$ — спин, $A = 2\Delta_{so}/3$ — константа, зависящая от величины спин-орбитального расщепления. Орбитальный момент складывается из двух физических величин — атомного орбитального момента $\hat{\mathbf{l}}_{at}$ и макроскопического момента $\hat{\mathbf{L}}$ связанного с огибающей волновой функцией: $\hat{\mathbf{l}} = \hat{\mathbf{l}}_{at} + \hat{\mathbf{L}}$. Макроскопический момент $\hat{\mathbf{L}}$ связан с локальной кривизной цепочки атомов в молекуле, именно он отражает симметрию расположения атомов. Запишем выражение для углового момента:

$$\hat{l}_\alpha = \frac{1}{\hbar} e_{\alpha\beta\gamma} \hat{p}_\beta \hat{r}_\gamma.$$

Выразим оператор импульса $\hat{\mathbf{p}}$ через гамильтониан \hat{H} и радиус-вектор электрона $\hat{\mathbf{r}}$. Пользуясь правилом дифференцирования операторов по времени

$$\hat{\mathbf{p}} = \frac{im}{\hbar} \left(\hat{H}_0 \hat{\mathbf{r}} - \hat{\mathbf{r}} \hat{H}_0 \right),$$

можно перейти к выражению для углового момента через радиус-вектор \mathbf{r} :

$$\hat{l}_\alpha = \frac{im}{\hbar^2} e_{\alpha\beta\gamma} \hat{r}_\beta \hat{H}_0 \hat{r}_\gamma.$$

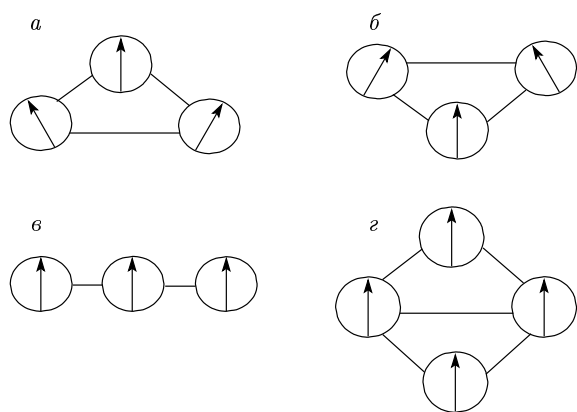


Рис. 2. Схематическое изображение модельных структур. Верхние молекулы (*a*, *b*) обладают структурной асимметрией. Нижние молекулы (*c*, *d*) имеют более высокую симметрию. Стрелки показывают направление эффективного спина

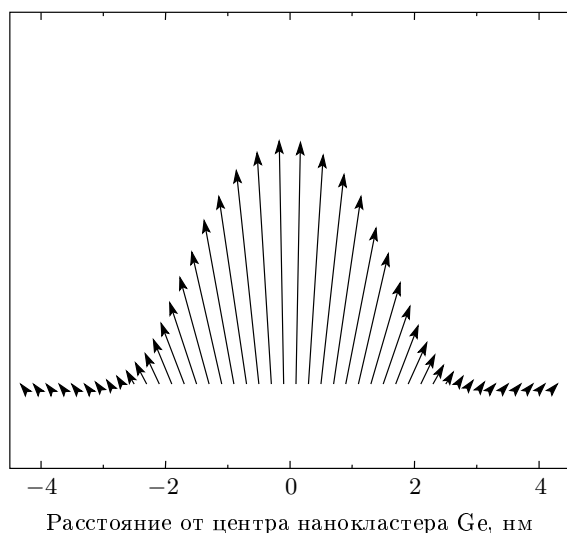


Рис. 3. Распределение спиновой плотности по нанокластеру Ge для основного состояния ($h = 1.5$ нм, $l = 15$ нм). Для наглядности угол отклонения эффективного спина увеличен в 5 раз

Если заменить операторы $\hat{\mathbf{r}} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z})$ координат частицы на операторы координат атомов $\hat{\mathbf{R}} = (\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z})$, то произойдет замена $\hat{\mathbf{I}}$ на $\hat{\mathbf{L}}$, т.е. операция замены $\hat{\mathbf{r}} = (\hat{x}, \hat{y}, \hat{z}) \rightarrow \hat{\mathbf{R}} = (\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z})$ эквивалентна отбрасыванию атомного орбитального момента $\hat{\mathbf{I}}_{at}$.

Таким образом, выражение для макроскопического момента запишется в виде

$$\hat{L}_\alpha = \frac{im}{\hbar^2} e_{\alpha\beta\gamma} \hat{R}_\beta \hat{H}_0 \hat{R}_\gamma,$$

где m — масса свободного электрона, $e_{\alpha\beta\gamma}$ — единичный антисимметричный тензор, \hat{H}_0 — гамильтониан.

Теперь воспользуемся соображениями симметрии. Сначала проследим влияние операции отражения в плоскости xy на отклонение среднего значения спина. После операции отражения молекула *a* переходит в молекулу *b* (см. рис. 2). Углы отклонения спина для молекул *a* и *b* противоположны: в молекуле *a* спин отклоняется от центра молекулы, а в молекуле *b* спин поворачивается к центру. Данный эффект можно объяснить сменой направления эффективного магнитного поля, вокруг которого поворачиваются спины.

Теперь рассмотрим, как меняется спин-орбитальное взаимодействие при отражении относительно плоскости xy . Поскольку данная операция сводится к повороту вокруг оси z на 180° и последующей инверсии,

$$\hat{R}_x \rightarrow \hat{R}_x, \quad \hat{R}_y \rightarrow \hat{R}_y, \quad \hat{R}_z \rightarrow -\hat{R}_z,$$

становится понятным, что операторы углового момента преобразуются так: оператор \hat{L}_z не меняется, а \hat{L}_x и \hat{L}_y меняют знаки. Логично предположить, что изменение знаков \hat{L}_x и \hat{L}_y и вызывает изменение направления эффективного магнитного поля, т.е. несет ответственность за отклонение спина.

В «квазидвумерных» структурах, таких как нанокластер Ge с высотой много меньшей, чем латеральный размер, возможно приближенное разделение переменных. А именно, волновую функцию $\psi(x, y, z)$ можно приближенно представить в виде произведения:

$$\psi(x, y, z) \approx \psi_{xy}(x, y) \psi_z(z; x, y).$$

Для движения в плоскости xy важны лишь средние значения потенциала $U(x, y) = \langle U(x, y, z) \rangle_z$, здесь скобки означают усреднение по z : $\langle U(x, y, z) \rangle_z = \langle \psi_z | U(x, y, z) | \psi_z \rangle$. Это же справедливо и для спин-орбитального взаимодействия. При усреднении по z спин-орбитальное взаимодействие (4) принимает вид

$$\hat{H}_{so} = A \left(\langle \hat{L}_x \rangle_z \hat{s}_x + \langle \hat{L}_y \rangle_z \hat{s}_y + \langle \hat{L}_z \rangle_z \hat{s}_z \right).$$

Для симметричных молекул средние значения $\langle \hat{L}_x \rangle_z$, $\langle \hat{L}_y \rangle_z$ обращаются в нуль, поскольку вклады от верхней и нижней частей молекулы компенсируют друг друга, и гамильтониан спин-орбитального взаимодействия в двумерном приближении будет таким:

$$\hat{H}_{so} = A \langle \hat{L}_z \rangle_z \hat{s}_z.$$

Очевидно, что в асимметричных структурах спин-орбитальное взаимодействие имеет добавку:

$$\hat{H}_{so}^{SIA} = A \left(\langle \hat{L}_x \rangle_z \hat{s}_x + \langle \hat{L}_y \rangle_z \hat{s}_y \right).$$

Если записать спин-орбитальное взаимодействие в виде взаимодействия с эффективным магнитным полем,

$$\hat{H}_{so}^{SIA} = A \left(\langle \hat{L}_x \rangle_z \hat{s}_x + \langle \hat{L}_y \rangle_z \hat{s}_y \right) = 2\mu_B \mathbf{H}_{eff} \hat{\mathbf{s}},$$

то станет понятным, что эффективное магнитное поле определяется так:

$$\mathbf{H}_{eff} = \frac{A}{2\mu_B} \left(\langle \hat{L}_x \rangle_z, \langle \hat{L}_y \rangle_z \right).$$

Можно записать спин-орбитальное взаимодействие, вызывающее отклонение спина в асимметричных структурах, подобных квантовым точкам, через координаты атомов:

$$\hat{H}_{so}^{SIA} = A \frac{im}{\hbar^2} \left(e_{x\beta\gamma} \hat{R}_\beta \hat{H}_0 \hat{R}_\gamma \hat{s}_x + e_{y\beta\gamma} \hat{R}_\beta \hat{H}_0 \hat{R}_\gamma \hat{s}_y \right).$$

Если рассмотреть туннелирование в соседнюю квантовую точку, то из соображений непрерывности можно заключить, что направление отклоненного спина передается как первоначальное в соседнюю квантовую точку и следующая квантовая точка будет поворачивать эффективный спин на такой же угол. Если построить цепочку из нескольких туннельно-связанных точек, то каждый раз при туннелировании из точки в точку спин будет поворачиваться на определенный угол, что приведет, в конце концов, к перевороту спина. Угол отклонения определяется отношением высоты квантовой точки h к ее латеральному размеру l , чем больше отношение h/l , тем больше угол отклонения. Это связано с тем, что при большей высоте квантовой точки средние значения угловых моментов L_x и L_y имеют большие значения.

Можно провести аналогию с асимметричными квантовыми ямами. В этом случае также работает поворотный механизм релаксации спина, определяемый взаимодействием Бычкова и Рашба [10].

3. РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ

На первом этапе мы рассчитали интегралы перекрытия с переворотом спина и без переворота спина и соответствующие вероятности резонансного туннелирования.

В расчеты заложены пирамидальная форма нанокластеров Ge и типичные размеры (высота $h = 1.5$ нм, сторона основания $l = 15$ нм).

При рассмотрении туннелирования между основными состояниями в соседних квантовых точках интегралы перекрытия составили около 0.01 мэВ для процессов без переворота спина и около 0.001 мэВ для процессов с переворотом спина. В соответствии с этими значениями вероятность перехода с переворотом спина на 2 порядка меньше, чем вероятность перехода без переворота спина. Другими словами, для основного состояния туннелирование осуществляется преимущественно с сохранением спина: на сто событий туннелирования приходится лишь один переворот спина. Для возбужденных состояний вероятность переворота спина возрастает. В среднем для возбужденных состояний на 5–10 событий туннелирования приходится один переворот спина.

Вероятности переворота спина зависят от размера и от формы квантовой точки, в частности, от отношения высоты к размеру основания нанокластера Ge, h/l . При фиксированном латеральном размере l и увеличении высоты квантовой точки h вероятность переворота спина возрастает. Например, при увеличении h до 4.5 нм вероятность туннелирования без переворота спина всего в два раза превышает вероятность туннелирования с переворотом спина, тогда как в случае $h = 1.5$ нм эти вероятности различаются на два порядка (данные приведены для $l = 15$ нм). Таким образом, чем больше отношение h/l , тем больше величина эффективного магнитного поля, поворачивающего спин.

Рассмотрим другие величины, необходимые для расчета времени спиновой релаксации. Кроме интегралов перекрытия $I_{ij}^{\uparrow\downarrow}$ и $I_{ij}^{\uparrow\uparrow}$ для расчетов необходимы матричные элементы $\langle |D_\Omega|^2 \rangle_{\uparrow\uparrow}$ и $\langle |D_\Omega|^2 \rangle_{\uparrow\downarrow}$. Для расчета данных матричных элементов мы использовали стандартную форму оператора электрон-фононного взаимодействия для состояний в валентной зоне в базисе sp^3 [16].

Различие матричных элементов $\langle |D_\Omega|^2 \rangle_{\uparrow\uparrow}$ и $\langle |D_\Omega|^2 \rangle_{\uparrow\downarrow}$ можно найти из изменения волновых функций в магнитном поле: $|\psi\rangle = |\psi_0\rangle + \sum_i \alpha_i(H) |\psi_i\rangle$.

Добавка состояния с противоположным спином пропорциональна $\alpha(H)$, поэтому отношение матричных элементов

$$\frac{\langle |D_\Omega|^2 \rangle_{\uparrow\downarrow}}{\langle |D_\Omega|^2 \rangle_{\uparrow\uparrow}} \sim \alpha^2(H).$$

В слабых магнитных полях величина α пропорциональна магнитному полю H и составляет $\alpha \sim 10^{-4}$

при $H = 1$ Тл, согласно расчетам волновых функций методом сильной связи.

Таким образом, можно сразу провести сравнение двух механизмов спиновой релаксации: 1) за счет структурной асимметрии квантовой точки и 2) за счет модификации волновых функций внешним магнитным полем. Квадраты интегралов перекрытия различаются на 2 порядка, а квадраты матричных элементов деформационных потенциалов — на 8 порядков (в магнитном поле $H = 1$ Тл). В результате $\Gamma_1/\Gamma_2 = 10^6$, и темп спиновой релаксации по SIA-механизму на 6 порядков выше, чем темп спиновой релаксации, вызванной внешним магнитным полем, т. е. структурная асимметрия квантовой точки приводит к стимуляции процессов спиновой релаксации при туннелировании между квантовыми точками.

Расчет времени спиновой релаксации проводится для характерных экспериментальных параметров массивов квантовых точек Ge. В области температур 4–20 К транспорт в массиве квантовых точек Ge осуществляется в режиме проводимости с переменной длиной прыжка, переходы происходят внутри оптимальной энергетической полосы шириной $\epsilon_0 = (kT)^{2/3}/(g(\mu)a^2)^{1/3}$ [17], где $g(\mu)$ — плотность состояний на уровне Ферми без учета кулоновской щели, a — радиус локализации. Например, при температуре $T = 4$ К ($kT \approx 0.34$ мэВ) ϵ_0 составляет около 1.4 мэВ, а при температуре $T = 10$ К ($kT \approx 0.86$ мэВ) $\epsilon_0 \approx 8.5$ мэВ. Будем использовать данные значения как характерную разницу энергий i -го и j -го центров.

Основное влияние на конечный результат оказывает величина интегралов перекрытия $I_{ij}^{\uparrow\downarrow}$. Они имеют экспоненциальную зависимость от расстояния между центрами. Расстояние между точками, связанными туннельной связью, может варьироваться в массиве в пределах 20%. На рис. 4 показано распределение расстояний между соседними квантовыми точками в одном из реальных массивов квантовых точек. Как видно на рисунке, существует характерное среднее расстояние между точками, близкое по значению к среднему размеру квантовой точки в массиве. Этому расстоянию соответствует интеграл перекрытия $I_{ij}^{\uparrow\downarrow} \sim 10^{-6}$ эВ. Для такого значения $I_{ij}^{\uparrow\downarrow}$ минимальное время спиновой релаксации составляет $\tau_{SIA} \approx 10^{-5}$ с при температуре $T = 10$ К. Если же рассматривать хвосты распределения, то им соответствуют как ультракороткие времена спиновой релаксации, так и крайне длинные. Интеграл перекрытия растет с уменьшением

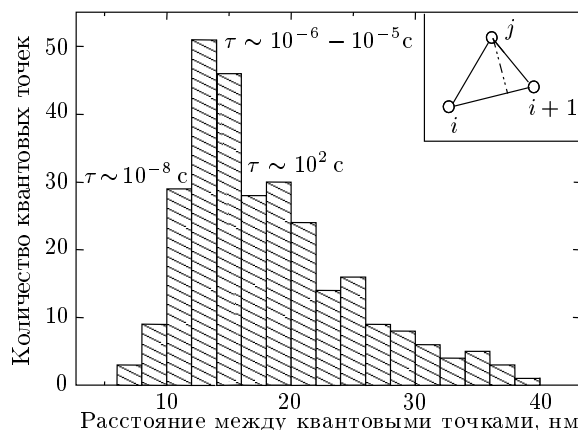


Рис. 4. Распределение расстояний между соседними квантовыми точками в одном из реальных массивов квантовых точек. Из рассмотрения исключены такие пары точек i и $i+1$, что расстояние между соединяющим их отрезком и любой другой точкой j меньше 10 нм (см. вставку)

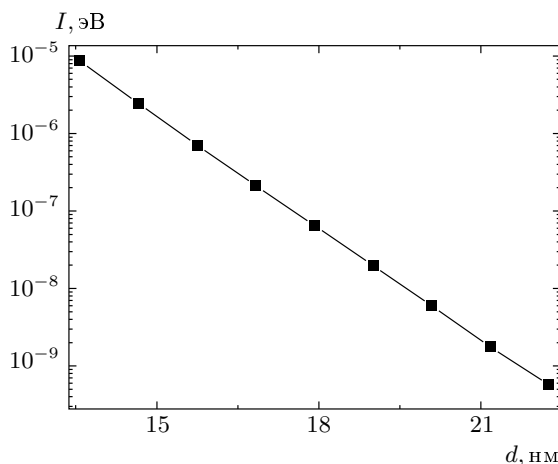


Рис. 5. Расчетная зависимость интеграла перекрытия I основных состояний дырок от расстояния d между центрами нанокластеров Ge

расстояния между точками (рис. 5). Для расстояния между точками $d = 10$ нм интеграл перекрытия достигает $I_{\uparrow\downarrow} \approx 10^{-3}$ эВ, соответственно время спиновой релаксации при туннелировании составит $\tau_{SIA} = 10^{-11}$ с. Но, как правило, такие маленькие квантовые точки не принадлежат перколяционному кластеру из-за большого отклонения положения энергетического уровня от среднего и поэтому не участвуют в спиновом транспорте.

Исследована зависимость скорости спиновой релаксации от магнитного поля и температуры (рис. 6). Следует сразу отметить, что зависимости

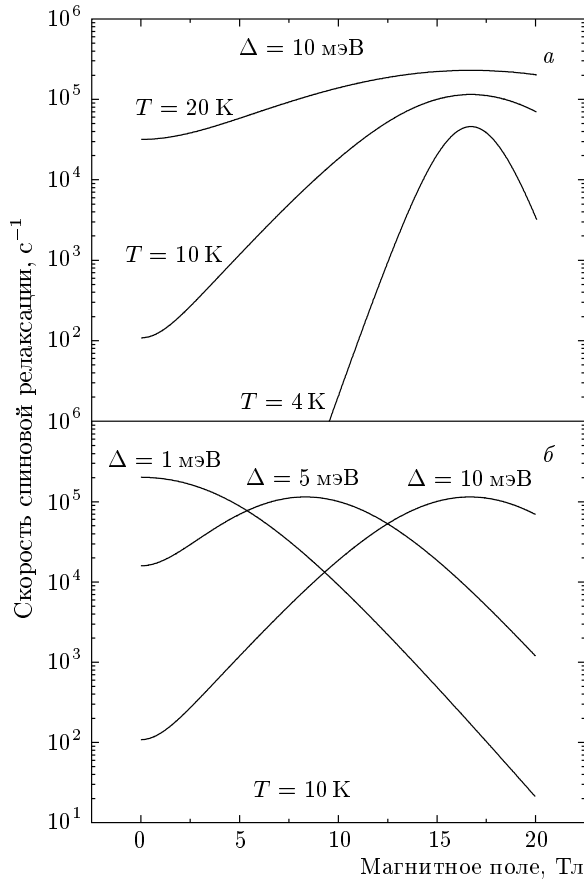


Рис. 6. Зависимость скорости спиновой релаксации от магнитного поля для различных температур (*а*) и энергетических зазоров (*б*) при туннелировании между двумя квантовыми точками

построены для некоторого перехода $i \rightarrow j$. Температурная зависимость в этом случае является отражением зависимости от температуры функции $F(n_q, N_i, N_j)$, включающей в себя фермиевскую и бозевскую функции распределения. Если же рассматривать температурную зависимость для переноса спина через весь массив квантовых точек, то при низких температурах она, так же как и сопротивление массива, будет определяться законом Эфроса–Шкловского $\tau_{SIA}^{-1} \sim \exp[-(T/T_0)^{1/2}]$ [17]. Это становится очевидным, если обратить внимание на то, что вероятность переворота спина при переходе $i \rightarrow j$ определяется точно таким же выражением, как и вероятность самого перехода, отличие только в коэффициенте $A_i^2 = (I_{ij}^{\uparrow\downarrow}/\Delta)^2$. При рассмотрении случая потери спиновой ориентации при случайном блуждании по массиву квантовых точек главную роль для спиновой релаксации будут играть переходы между квантовыми точками, имеющими сильную туннельную связь (наибольшие интегралы

перекрывтия). В таких парах точек спиновая релаксация будет происходить наиболее эффективно. В данном случае температурная зависимость спиновой релаксации будет определяться именно такими переходами, точнее, зависимостью $F(n_q, N_i, N_j)$ для таких переходов.

Зависимость скорости спиновой релаксации от магнитного поля для отдельного перехода $i \rightarrow j$ представляет собой куполообразную кривую с максимумом при некотором характерном магнитном поле. Значение этого магнитного поля определяется энергетическим зазором $\Delta = \varepsilon_j - \varepsilon_i$, где ε_i и ε_j — энергии уровней в i -й и j -й точках. Мы рассмотрели простой случай, когда уровень Ферми совпадает с серединой энергетического зазора d , когда i -я точка заполнена, а j -я точка пуста. При увеличении магнитного поля энергетический зазор между состоянием со спином вверх в i -й точке $|i, \uparrow\rangle$ и состоянием со спином вниз в j -й точке $|j, \downarrow\rangle$ уменьшается, что приводит к возрастанию интенсивности перехода. При величине зеемановского расщепления $E_z = \Delta$ наблюдается резонансное туннелирование с переворотом спина. Дальнейшее увеличение магнитного поля приводит к росту энергетического зазора между этими состояниями и к падению интенсивности перехода.

Экспериментальное изучение этой зависимости в реальном массиве квантовых точек представляется затруднительным, поскольку из-за разброса по энергиям каждая пара точек будет иметь свой энергетический зазор Δ и свое положение максимума (рис. 6б). В результате в малых полях будет наблюдаться некое среднее значение темпа спиновой релаксации, близкое к максимальному. При дальнейшем увеличении магнитного поля время спиновой релаксации будет следовать тем же закономерностям, что и сопротивление массива квантовых точек. Как правило, здесь играют роль такие факторы, как сжатие волновых функций в магнитном поле и увеличение энергетического зазора между разными спиновыми состояниями с ростом магнитного поля.

Обсудим другие механизмы спиновой релаксации, играющие роль при спиновом транспорте в массивах квантовых точек Ge. Переворот спина может произойти на двух этапах транспорта: либо когда носитель локализован внутри квантовой точки, либо при туннелировании между двумя квантовыми точками. Переворот спина внутри квантовой точки может стать основным каналом спиновой релаксации при малых значениях интегралов перекрытий. Он детально был рассмотрен в работе [18]. Основ-

ным механизмом спиновой релаксации в данном случае является взаимодействие с фононами. Наряду с фононным механизмом в определенных условиях может проявиться механизм спиновой релаксации, связанный с флуктуациями электрического поля за счет быстрых перемещений зарядов в массиве квантовых точек [19]. При температуре 4 К вклады этих двух механизмов сравнимы, оба дают время спиновой релаксации внутри квантовых точек $\tau \approx 10^{-4}$ с, а при достаточно низких температурах преобладающим может стать флуктуационный механизм. Условием проявления флуктуационного механизма является существование в массиве достаточного количества пар точек, связанных сильной туннельной связью, имеющих общий электрон (дырку) и играющих роль флуктуаторов. Спиновая релаксация за счет сверхтонкого взаимодействия $\hat{H} = A\hat{S}\hat{I}$ является несущественной для квантовых точек Ge, поскольку в качестве локализованных в них носителей выступают дырки. Дырочные состояния построены в основном из p -орбиталей, для которых константа сверхтонкого взаимодействия $A \approx \psi^2(r_n)$, где r_n — радиус-вектор некоторого ядра.

Таким образом, в малых магнитных полях ($H \approx 1$ Тл) при температурах около 4 К в типичных массивах квантовых точек Ge основным механизмом спиновой релаксации будет переворот спина при туннелировании между квантовыми точками.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Теоретически исследована спиновая релаксация при прыжковом транспорте в двумерном массиве квантовых точек Ge. Проведено сравнение двух случаев спиновой релаксации: для квантовых точек, обладающих структурной асимметрией и не обладающих ею. Установлено, что отсутствие симметрии «верх–низ» у квантовой точки Ge приводит к усилению спиновой релаксации при туннелировании между квантовыми точками. Темп спиновой релаксации для асимметричных точек в 10^6 раз больше, чем для симметричных точек в магнитном поле 1 Тл. Таким образом, геометрия квантовой точки приводит к появлению нового механизма спиновой релаксации за счет структурной асимметрии нанообъекта. Предложено выражение для спин-орбитального взаимодействия, вызывающего переворот спина при туннелировании, в приближении сильной связи.

Работа выполнена при финансовой поддержке РАН (программа ОФН «Спин-зависимые эффекты

в твердых телах и спинтроника»), РФФИ (гранты №№ 05-02-16285, 06-02-16988 и 05-02-39006-ГФЕН), СО РАН (Лаврентьевский грант № 57) и фонда «Династия» и гранта Президента РФ (МК-4655.2006.2).

ЛИТЕРАТУРА

1. J. Schliemann, J. C. Egues, and D. Loss, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 146801 (2003).
2. J. M. Kikkawa and D. D. Awschalom, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 4313 (1998).
3. P. Recher, E. V. Sukhorukov, and D. Loss, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 1962 (2000).
4. I. Zutic, J. Fabian, and S. Das Sarma, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 323 (2004).
5. О. П. Пчеляков, Ю. Б. Болховитянов, А. В. Двуреченский и др., *ФТП* **34**, 1281 (2000).
6. M. Stoffel, A. Rastelli, S. Kiravittaya, and O. G. Schmidt, *Phys. Rev. B* **72**, 205411 (2005).
7. H. Heidemeyer, C. Müller, and O. G. Schmidt, *J. Cryst. Growth* **261**, 444 (2004).
8. B. I. Shklovskii, *Phys. Rev. B* **73**, 193201 (2006).
9. I. S. Lyubinsky, A. P. Dmitriev, and V. Yu. Kachorovskii, *Proc. 14th Int. Symp. «Nanostructures: Physics and Technology»*, St. Petersburg (2006), p. 57.
10. Ю. А. Бычков, Э. И. Рашба, *Письма в ЖЭТФ* **39**, 66 (1984).
11. A. F. Zinovieva, A. V. Nenashev, and A. V. Dvurechenskii, *Phys. Rev. B* **71**, 033310 (2005).
12. J. A. Chroboczek, E. W. Prohofsky, and R. J. Sladek, *Phys. Rev.* **169**, 593 (1968).
13. A. V. Nenashev, A. V. Dvurechenskii, and A. F. Zinovieva, *Phys. Rev. B* **67**, 205301 (2003).
14. *Оптическая ориентация*, под ред. Б. П. Захарчени и Ф. Майера, Наука, Ленинград (1989), с. 72.
15. D. J. Chadi, *Phys. Rev. B* **16**, 790 (1977).
16. Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус, *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках*, Наука, Москва (1972), с. 393.
17. В. Ф. Гантмахер, *Электроны в неупорядоченных средах*, Наука, Москва (2003), с. 70.
18. А. Ф. Зиновьева, А. В. Ненашев, А. В. Двуреченский, *Письма в ЖЭТФ* **82**, 336 (2005).
19. A. F. Zinovieva, A. V. Nenashev, and A. V. Dvurechenskii, *Proc. 14th Int. Symp. «Nanostructures: Physics and Technology»*, St. Petersburg (2006), p. 363.