

# Спиновая динамика электронов в гетероструктурах германий-кремний с квантовыми точками

*Состав коллектива:*

к.ф.-м.н. Зиновьева Айгуль Фанизовна  
к.ф.-м.н. Ненашев Алексей Владимирович  
Кошкарев Антон Александрович

---

*Постановка задачи:*

Цель данной работы - расчет методом сильной связи энергетического спектра и волновых функций электронов локализованных вблизи германиевых или кремниевых квантовых точек.

Достижение данной цели позволит решить поставленные задачи:

1. Расчет времени спиновой релаксации при туннелировании электронов между квантовыми точками. Демонстрация на основе расчетов методом сильной связи существования эффективного магнитного поля для электронных состояний в плотных массивах Ge/Si квантовых точек.
2. Расчет времени спиновой релаксации за счет спин-фононного взаимодействия в изолированной квантовой точке. Объяснение анизотропии ширины ЭПР-линии для упорядоченных массивов квантовых точек.

*Современное состояние проблемы:*

Данная работа лежит в русле исследований спиновых явлений в наноструктурах, которые в настоящее время рассматриваются как одно из актуальных направлений современной физики твёрдого тела. Это направление получило отдельное название "спинтроника" и связано с потенциальным применением спиновой степени свободы для создания различных приборов. Создание низкоразмерных наноструктур резко стимулировало исследование спиновой динамики в полупроводниках в последние два десятилетия. Особое внимание уделяется структурам с квантовыми точками (КТ), в которых контроль и управление спиновым состоянием легче осуществить, чем в других спиновых системах, поскольку движение носителей в них ограничено в трех направлениях.

Квантовые точки с размерами  $\sim 10$  нм представляют как самостоятельный научный интерес (искусственные атомы, содержащие несколько электронов/дырок), так и служат уникальным объектом для понимания электронных явлений в наноструктурах.

К настоящему времени накоплен обширный экспериментальный материал по атомной структуре, электрическим и оптическим свойствам массивов Ge квантовых точек в кремнии. Использование реалистичных математических моделей квантовой точки, учитывающих трёхмерную геометрию нанокластера и неоднородное поле упругой деформации, необходимо для надёжной интерпретации экспериментальных данных, а также в плане предсказания изменений электронной структуры квантовых точек при варьировании условий синтеза структуры.

*Подробное описание работы, включая используемые алгоритмы:*

Решена задача по нахождению энергетического спектра электрона, локализованного вблизи вершины квантовой точки. Расчеты проводились для Ge квантовой точки в форме квадратной пирамиды с латеральным размером 10 нм, высотой 1 нм, встроенной в Si матрицу. Расчетная ячейка имела размер  $20 \times 20 \times 20$  постоянных решеток ( $11\text{нм} \times 11\text{нм} \times 11\text{нм}$ ) (см. рис.1). Пример расчета можно наблюдать на рис.2.

На основе метода сильной связи исследована спиновая релаксация при резонансном туннелировании электрона между двумя туннельно-связанными Ge квантовыми точками, помещенными в матрицу Si. Для вычисления времени спиновой релаксации была рассчитана вероятность переворота спина при туннелировании. Вероятность туннелирования зависит от квадрата модуля интеграла перекрытия между волновыми функциями в соседних квантовых точках:  $W_{ij} = \frac{2\pi}{\hbar} |I_{ij}|^2 \delta(\varepsilon_i - \varepsilon_j)$ , здесь  $I_{ij}$  - интеграл перекрытия,  $\varepsilon_i, \varepsilon_j$  - энергии электронов в  $i$  и  $j$  квантовой точке. Для нахождения интеграла перекрытия был рассмотрен бесконечный одномерный кристалл, построенный из одинаковых Ge квантовых точек. Ширина зоны такого кристалла определяется интегралом перекрытия. Задача о спектре кристалла из квантовых точек была решена путём нахождения собственных значений для модельной структуры, представляющей собой Si параллелепипед со встроенной внутрь Ge квантовой точкой (см.рис.2(а)). Было использовано приближение сильной связи с базисом  $sp^3s^*$ , содержащим по 10 атомных орбиталей (с учётом спина) на каждом атоме. Всего в расчёт было вовлечено  $\sim 10^5$  орбиталей, что определяет размерность матрицы гамильтониана. В гамильтониан были включены слагаемые, соответствующие взаимодействиям между ближайшими соседями, спин-орбитальному взаимодействию и деформационным эффектам. Параметры модели были подобраны так, чтобы модель обеспечивала правильные значения эффективных масс электронов и правильно описывала положения минимумов энергетических долин в объемном кристаллах Si и Ge. Для связей Si-Ge были взяты средние значения параметров сильной связи. Значения энергии вычислялись путём решения уравнения Шрёдингера. Для численного решения уравнения Шрёдингера был выбран метод FEAST из библиотеки MKL.

#### *Полученные результаты:*

Был проведен расчет для системы с Ge квантовыми точками, встроенными в Si матрицу. В этой системе электроны локализуются в Si вблизи Ge квантовых точек (см.рис.2) в потенциальных ямах, образованных за счет деформации. Для малых размеров  $l = 10\text{нм}$ ,  $h = 1\text{нм}$ , электрон локализуется вблизи вершин квантовых точек. Расчет, проведенный для описанной структуры с Ge квантовыми точками дал  $\Delta E_{\uparrow\downarrow} = 10^{-7}\text{эВ}$ , что дает значение интеграла перекрытия с переворотом спина  $I_{\uparrow\downarrow} = 0.25 \cdot 10^{-7}\text{эВ}$ , и соответственно константу Рашбы  $\alpha = 0.6 \cdot 10^{-13}\text{эВ} \cdot \text{см}$ .

Расчет, проведенный для структуры с Si квантовыми точками, встроенными в Ge матрицу (3), с размерами квантовых точек  $l = 10\text{нм}$  (размер основания),  $h = 1\text{нм}$  (высота), дал  $\Delta E_{\uparrow\downarrow} = 4 \cdot 10^{-7}\text{эВ}$ , что дает значение интеграла перекрытия с переворотом спина  $I_{\uparrow\downarrow} = 10^{-7}\text{эВ}$ , и соответственно константу Рашбы  $\alpha = 2.4 \cdot 10^{-13}\text{эВ} \cdot \text{см}$ .

Известно из эксперимента время спиновой релаксации для электронов в системе с Ge квантовыми точками  $10 \mu\text{с}$ . Время спиновой релаксации обратно пропорционально квадрату интеграла перекрытия с переворотом спина. Взяв отношение времен равным отношению квадратов интегралов, можно оценить время спиновой релаксации в системе с Si квантовыми точками, как  $10\text{нс}$ .

Для расчетов спиновой релаксации за счет спин-фононного взаимодействия была взята та же модель (рис.1) германиевой КТ в кремниевой матрице. Было рассчитано

время спиновой релаксации в отсутствии магнитного поля. Вероятность спиновой релаксации в этом случае равна нулю, потому что матричный элемент  $\langle \Psi_{0\uparrow} | \mathbf{r} | \Psi_{0\downarrow} \rangle$  равен нулю.

В случаях с магнитным полем равным 1 Тесла: а)  $\mathbf{H} = (0, 0, H_z)$ , б)  $\mathbf{H} = (H_x, 0, 0)$ ; были получены времена спиновой релаксации, которые равны соответственно: а)  $\tau = 50\text{с}$ , б)  $\tau = 1\text{с}$ .

*Иллюстрации, визуализации результатов:*

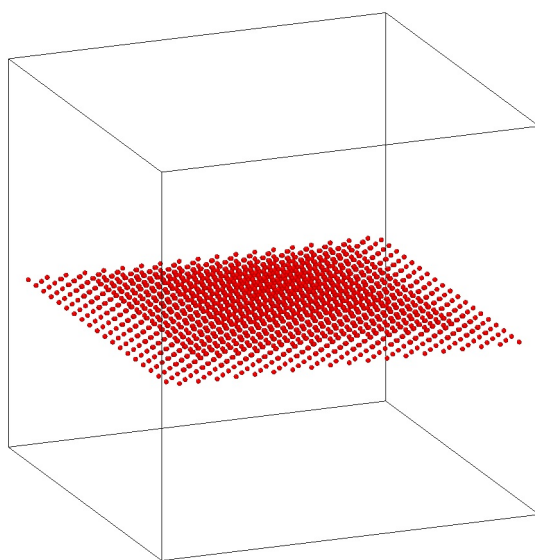


Рис. 1: Расчетная структура

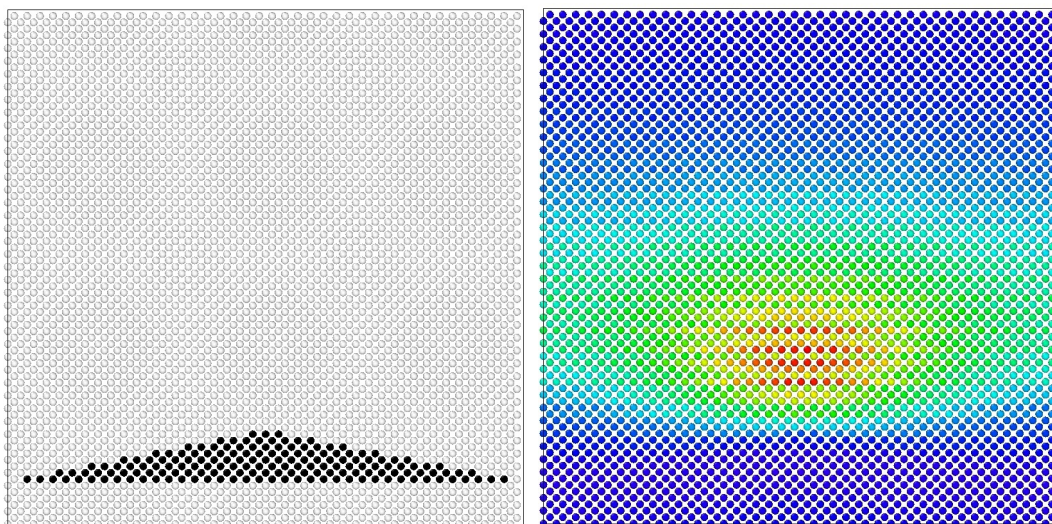


Рис. 2: а) (слева) структура Ge КТ в матрице Si, вид сбоку; б) (справа) распределение вероятности нахождения электрона в основном состоянии локализованном в потенциальной яме вблизи Ge КТ.

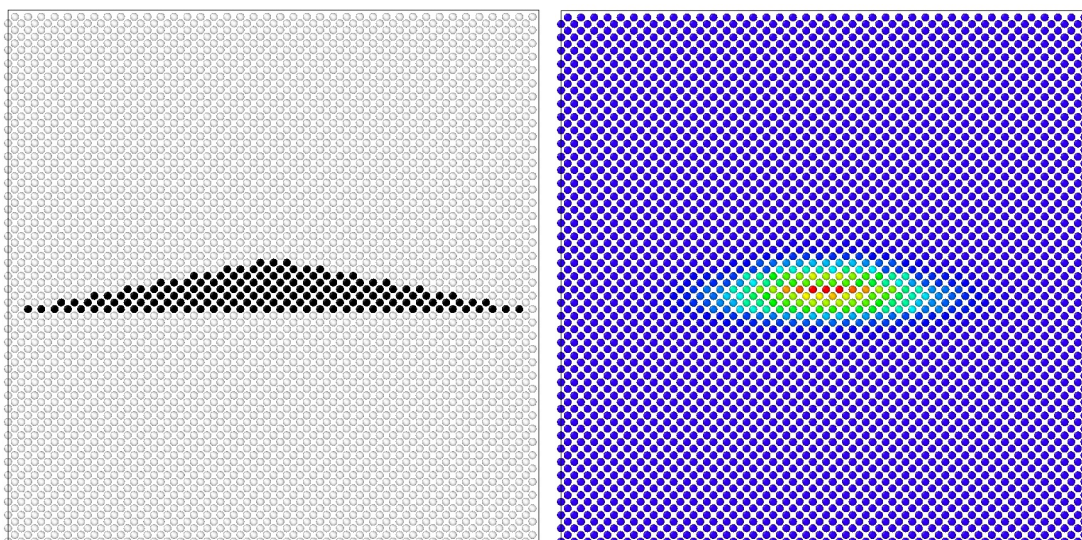


Рис. 3: а) (слева) структура Si КТ в матрице Ge, вид сбоку; б) (справа) распределение вероятности нахождения электрона в основном состоянии локализованном в Si КТ.

*Эффект от использования кластера в достижении целей работы:*

На данный момент сервер **HP DL980 G7** с общей памятью RAM 2 TB позволяет решение задач методом сильной связи  $sp3s^*$  с учетом вторых ближайших соседей для размеров КТ 10нм. Единичный расчет занимает 200-300GB RAM и 2-3 дня процессорного времени 32 ядер. Подобный расчет на другой машине занимал бы на порядок (или два) большее время, поскольку потребовалось бы использование файла подкачки на жестком диске, что существенно снижает скорость расчетов. (Сравним скорость чтения/записи DDR3  $2*800MHz*2*64bit/(Byte/8bit)=25GB/s$  и HDD 7200rpm buffered 240MB/s или SSD buffered 5GB/s).

*Перечень публикаций, содержащих результаты работы:*

- [1] А.А. Кошкарев. Учет анизотропии при вычислении распределения упругой деформации в квантовых проволоках. Материалы 50-й Международной научной конференции "Студент и научно-технический прогресс": Физика твердого тела и электроника, 13-19 апреля 2012г / Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 2012. с.36.
- [2] А.В. Ненашев, А.А. Кошкарев, А.В. Двуреченский. Двумерное распределение деформации в упругоанизотропных гетероструктурах. Издательство СО РАН Автометрия, Новосибирск 2013. №5 с.25-36
- [3] А.А. Кошкарев. Спиновая релаксация в системе Ge-Si с квантовыми точками - расчет методом сильной связи. Материалы 52-й международной научной студенческой конференции МНСК-2014: Квантовая физика, 11-18 апреля 2014г / Новосиб. гос. ун-т. Новосибирск, 2014. с.22.