Письма в ЖЭТФ, том 103, вып. 8, с. 584 – 587

Численное моделирование динамики спина электрона и поляризованных ядер в квантовой точке

В. А. Абалмасов[1)]

Институт автоматики и электрометрии СО РАН, 630090 Новосибирск, Россия

Поступила в редакцию 1 марта 2016 г.
После переработки 11 марта 2016 г.

Вычисляется динамика спина локализованного электрона при сверхтонком взаимодействии с большим числом изначально поляризованных ядер с неоднородной константой связи методом диагонализации. В отсутствие внешнего магнитного поля декогеренция спина электрона на больших временах не является полной в силу конечного числа ядер. Асимптотическое поведение амплитуды колебаний согласуется с имеющимся в литературе аналитическим выражением.

DOI: 10.7868/S0370274X16080051

1. Введение. В настоящее время спины локализованного электрона и ядер кристаллической решетки находятся в центре внимания исследователей в связи с их возможным использованием в качестве квантовых битов (кубитов) информации в квантовых вычислениях [1, 2]. Необходимым условием для кандидата на роль кубита является большое время декогеренции. Основным источником декогеренции спина электрона, локализованного в квантовой точке или на донорной примеси в твердом теле при низких температурах, является сверхтонкое взаимодействие со спинами ядер кристаллической решетки [3].

В работе [4] было получено точное интегральное выражение для временной зависимости проекции спина электрона $\langle S_z(t)\rangle$ в случае полностью поляризованного начального состояния ядерных спинов. В случае произвольного начального состояния ядерной системы точного решения не существует, а подход в рамках стандартной теории возмущений приводит к выражениям с нулевым знаменателем в высших порядках ввиду близости собственных значений энергии невозмущенного гамильтониана и оказывается несостоятельным [4]. Теория возмущений, используемая в работах [5, 6], лишена указанного недостатка. Она позволяет вычислить динамику спина электрона во внешнем магнитном поле B, большем флуктуаций эффективного магнитного поля N ядер, т.е. при условии $|g\mu_{\rm B}B| > A/\sqrt{N}$, где $A = \sum_{i=1}^{N} A_i$, A_i – константа сверхтонкого взаимодействия электрона с i-м ядром, g, $\mu_{\rm B}$ – g-фактор электрона и магнетон Бора соответственно.

Точное численное решение данной задачи методом диагонализации матрицы гамильтониана взаимодействия было получено для различных начальных состояний ядерной системы и небольшого числа ядерных спинов, $N = 14$ и 29 [7], ограниченного ввиду большого полного размера матрицы 2^N. В отличие от метода диагонализации другие численные методы [8] не позволяют производить вычисления для произвольного интервала времени без накопления численных ошибок, ограничиваясь при этом тем же количеством ядер [9].

Что касается эксперимента, то исследования декогеренции электронного спина производятся с совокупностью спинов (распределенных либо пространственно, либо во временном интервале), которые, как правило, находятся в разном эффективном поле ядер. В таком случае регистрируемый сигнал, если не предпринимать никаких мер, отображает в большей степени статистическое распределение по этому полю. Чтобы избежать эффекта подобного усреднения и связанной с ним дефазировки сигнала, используют метод спинового эха [10]. В этом случае эксперимент указывает на достаточно большое время декогеренции, до 200 мкс, для спина электрона, локализованного в квантовых точках из GaAs, сформированных электродами в двумерном электронном газе, даже при неполяризованных ядрах [11]. Полностью поляризованное состояние ядерных спинов в эксперименте пока недоступно.

В данной работе мы приводим результаты численного моделирования динамики спина электрона при его взаимодействии с большим количеством изначально полностью поляризованных ядерных спинов, производя вычисления методом диагонализа-

[1)]e-mail: abalmassov@iae.nsk.su

ции матрицы гамильтониана подобно [7]. Указанное начальное состояние ядерных спинов подразумевает диагонализацию матрицы размера $N+1$, в отличие от общего случая начальной проекции суммарного спина электрона и ядер $|J_z| < (N-1)/2$, когда размер матрицы равен биномиальному коэффициенту $C_{N+1}^{(N+1)/2-J_z}$ [7]. Использование большого числа ядерных спинов позволяет более детальным образом провести сравнение с имеющимся аналитическим решением [4].

2. Постановка и метод решения задачи. Гамильтониан для спина электрона $\mathbf{S}$ во внешнем магнитном поле $\mathbf{B} = (0,0,B_z)$ при сверхтонком взаимодействии со спинами ядер $\mathbf{I}_i$ в квантовой точке имеет вид

$$H = g\mu_{\mathrm{B}} S_z B_z + \mathbf{S}\sum_{i=1}^{N} A_i \mathbf{I}_i. \qquad (1)$$

Мы пренебрегаем взаимодействием ядер с магнитным полем, имея в виду малость ядерного магнетона. Константа связи с i-м ядром $A_i = Av_0|\Psi(\mathbf{r}_i)|^2$ определяется значением квадрата координатной волновой функции локализованного электрона $\Psi(\mathbf{r}_i)$ в точке расположения ядра $\mathbf{r}_i$ (здесь v_0 – объем, приходящийся на один ядерный спин). При решении данной задачи обычно принимают $A > 0$, что соответствует арсениду галлия (в кремнии $A < 0$), и для простоты полагают $I_i = 1/2$ (в то время как в арсениде галлия $I_i = 3/2$ и константа связи дополнительно зависит от типа ядра) [4, 7].

Подобно [7] мы равномерно распределяем N ядерных спинов внутри сферы радиуса $R = (3Nv_0/4\pi)^{1/3}$ и используем волновую функцию основного состояния электрона в трехмерном сферически-симметричном гармоническом потенциале:

$$|\Psi(\mathbf{r})|^2 = a/R\sqrt{\pi})^3 e^{-(ar/R)^2}, \qquad (2)$$

где параметр a характеризует степень локализации электрона в квантовой точке.

Гамильтониан (1) сохраняет полный спин электрона и ядер $\mathbf{J} = \mathbf{S} + \sum_i \mathbf{I}_i$, поэтому имеет недиагональные матричные элементы только между состояниями с одинаковой проекцией полного спина J_z. При этом действие поперечной части сверхтонкого взаимодействия $S_x I_x + S_y I_y = (S_+ I_- + S_- I_+)/2$ на каждое из ядер приводит к одновременному перевороту электронного и ядерного спинов в противоположных направлениях (индексы “$\pm$” соответствуют повышающему и понижающему оператору). В частности, для $J_z = (1-N)/2$, кроме диагональных элементов, отличны от нуля только матричные элементы между состоянием $|N+1\rangle = |\Uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\ \dots\ \downarrow\rangle$, с одной стороны, и состояниями $|1\rangle = |\Downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\ \dots\ \downarrow\rangle$, $|2\rangle = |\Downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\dots\downarrow\rangle$, ..., $|N\rangle = |\Downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\dots\uparrow\rangle$ с другой, где спину электрона отвечает двойная стрелка.

Пусть изначально система находится в состоянии $|N+1\rangle = |\Uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\ \dots\ \downarrow\rangle$, т.е. ядра полностью поляризованы, а спин электрона направлен противоположно их спинам. В произвольный момент времени спиновую волновую функцию системы можно представить в виде суммы: $\varphi(t) = \sum_{i=1}^{N+1}\beta_i(t)|i\rangle$, где коэффициенты разложения определяются как $\beta_i(t) = \langle i|V^{\dagger}e^{-i\omega t}V|N+1\rangle$, $\omega = \mathrm{diag}[\omega_1, ..., \omega_{N+1}]$ – диагональная матрица, составленная из собственных значений оператора $H/\hbar$ (в дальнейшем мы полагаем $\hbar = 1$), V – унитарная матрица преобразования от базиса собственных векторов оператора J_z к базису собственных векторов H. С учетом нормировки волновой функции, $\sum_{i=1}^{N+1}|\beta_i(t)|^2 = 1$, для проекции спина электрона в произвольный момент времени имеем $\langle S_z(t)\rangle = |\beta_{N+1}(t)|^2 - 1/2$ [4].

3. Результаты и обсуждение. На рис. 1 приведены собственные значения λ_n матрицы гамильтониана и их отличие от диагональных элементов матрицы $H_{n,n}$ в базисе собственных функций $|i\rangle$ оператора J_z (за исключением единственного отрицательного значения $\lambda_{N+1} = -0.2417$ и, соответственно, разности $\lambda_{N+1} - H_{N+1,N+1} = -0.0032$) в отсутствие внешнего магнитного поля для умеренного числа ядер $N = 350$ при значении параметра локализации электрона в квантовой точке $a = 2$. Диагональные элементы матрицы гамильтониана определяются константами связи $H_{n,n} = A/4 - A_n/2$, $H_{N+1,N+1} = -A/4$, и их отличие от собственных значений λ_n крайне незначительно.

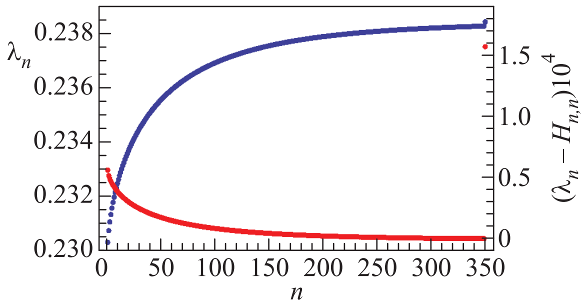

Рис. 1. (Цветной онлайн) Собственные значения $\lambda_n > 0$ гамильтониана и их отличие от диагональных элементов матрицы гамильтониана $H_{n,n}$ в базисе собственных функций проекции полного спина J_z (нижняя ветвь, правая ось)

На рис. 2 показаны зависимости от времени проекции спина электрона $\langle S_z(t)\rangle$ в отсутствие внешнего магнитного поля (нижние полосы) и в магнитном

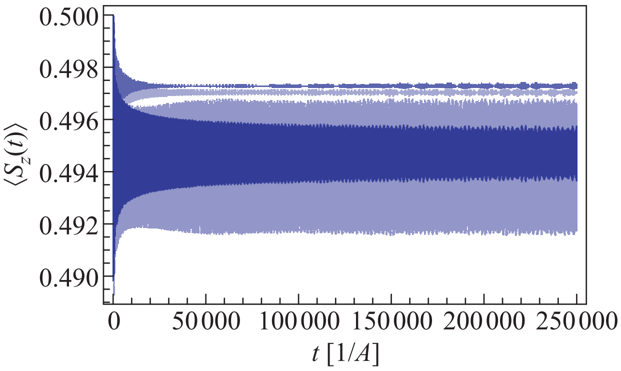

Рис. 2. (Цветной онлайн) Зависимости проекции спина электрона от времени для числа ядер $N = 800$ и параметра локализации $a = 2$ (темный тон), а также $N = 2400$ и $a = 2.88$ (светлый тон). Верхние полосы соответствуют магнитному полю $B = 0.2\,A/g\mu_{\rm B}$, нижние – отсутствию магнитного поля

поле $B = 0.2\,A/g\mu_{\rm B}$ (верхние линии) для числа ядер $N = 800$ при значении параметра локализации $a = 2$ (светлым тоном) и $N = 2400$ при $a = 2.88$ (темным тоном). Значение параметра $a = 2$ использовалось в работе [7], динамику спина электрона из которой для $N = 14$ мы в точности воспроизводим. Другое значение этого параметра выбрано исходя из условия $N/a^3 = N_0$, что обеспечивает одинаковое число ядер в пределах среднеквадратичного отклонения квадрата волновой функции электрона (в нашем случае $N_0 = 100$). Основные колебания проекции спина происходят на частоте $\omega = A/2$ с периодом $T = 4\pi/A$ и модулируются частотой, определяемой шириной положительной составляющей спектра $\omega_0 \approx A_0/2$ (рис. 1). Во внешнем магнитном поле частота колебаний ω увеличивается.

Прежде всего отметим, что в отсутствие магнитного поля амплитуда колебаний на больших временах стремится к постоянному значению, которое при одинаковом эффективном числе ядер N_0 уменьшается при увеличении полного числа ядер N. Действительно, выражение для амплитуды колебаний из работы [4] имеет не зависящий от времени вклад порядка $1/N$ от полюса $\omega = 0$ (в обозначениях работы [4]), который в нашей работе соответствует собственному значению λ_N (точка на рис. 1 чуть выше кривой). Этот вклад исчезает после замены суммирования по всем ядрам на интегрирование по всему пространству, предполагающее $N \to \infty$. Среднее по времени значение $\langle S_z \rangle$ при увеличении N изменяется незначительно (от $\langle S_z \rangle = 0.4941$ до 0.4947) и определяется согласно [4] эффективным числом ядер N_0.

Во внешнем магнитном поле $B \gtrsim 0.15\,A/g\mu_{\rm B}$ колебания со временем практически исчезают, но хаотически возобновляются с малой амплитудой, не зависящей от полного числа ядер N. Вычисления показывают, что отношение средней амплитуды этих колебаний к амплитуде начальных колебаний убывает обратно пропорционально $\sqrt{N_0}$, что указывает на их флуктуационную природу. Аналитическое выражение из работы [4] не описывает данные флуктуации в силу замены суммирования по дискретному множеству ядер на интегрирование по континууму.

Асимптотическое поведение $(\ln\tau)^{-3/2}$ амплитуды колебаний $\langle S_z(t) \rangle$ в отсутствие магнитного поля было предсказано в [4] для квадрата волновой функции электрона гауссова вида $\chi_0^2(z) = \pi^{-1/2}\exp(-z^2)$, где $\tau = At\chi_0(0)^2/(2\pi N_0)$. Из работы [4] следует, что такое поведение относится к достаточно большим временам, когда $\ln\tau > 3\pi/2$, что при $N_0 = 100$ соответствует $t > 10^5/A$. До этого времени при $\tau > 1$ амплитуда колебаний равна $w - q(\ln\tau)^{1/2}$, где w, q – некоторые константы. На рис. 3 показана аппроксимация

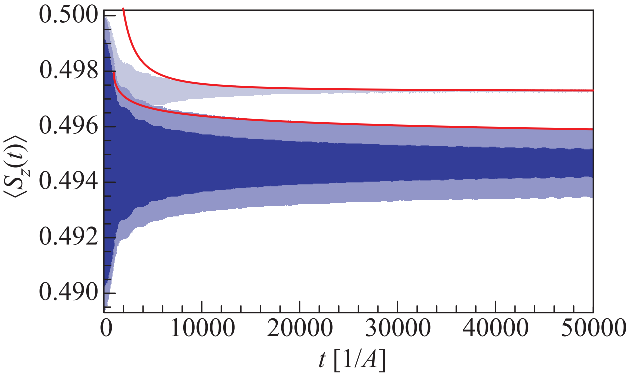

Рис. 3. (Цветной онлайн) Аппроксимация огибающей колебаний $\langle S_z(t) \rangle$ в отсутствие внешнего поля (внизу) и в магнитном поле $B = 0.2\,A/g\mu_{\rm B}$ (вверху)

данной функцией амплитуды колебаний в отсутствие магнитного поля и функцией $\langle S_z \rangle - q(At)^{-3/2}$ в магнитном поле $B = 0.2\,A/g\mu_{\rm B}$ при $N = 2400$, $a = 2.88$. В отсутствие магнитного поля значения параметров подгонки составляют $w = 0.4980$, $q = 0.0010$ при $\tau = 0.0009At$, во внешнем магнитном поле – $q = 261.1$ при $\langle S_z \rangle = 0.4973$. Темным цветом на рис. 3 показаны колебания $\langle S_z(t) \rangle$ за вычетом вклада гармоники, учет которой приводит к постоянной по времени амплитуде колебаний. На временах $t > 10^5/A$ амплитуда этих колебаний уменьшается незначительно и практически полностью определяется флуктуациями, связанными с конечным числом ядер N_0 в области локализации электрона.

4. Заключение. Наши расчеты динамики спина локализованного электрона при взаимодействии с большим числом изначально поляризованных ядер кристаллической решетки в целом подтверждают результаты аналитического рассмотрения данной задачи [4]. Во внешнем магнитном поле колебания электронного спина в результате декогеренции затухают на больших временах как $t^{-3/2}$. В отсутствие магнитного поля амплитуда колебаний уменьшается практически до нуля согласно зависимости const$-(\ln\tau)^{1/2}$ до тех пор, пока не выполняется условие $\ln\tau \sim 3\pi/2$, при котором происходит переход на асимптотику $(\ln\tau)^{-3/2}$.

Автор благодарит Е.В. Подивилова и А.М. Шалагина за полезные замечания.

1. D. Loss and D. P. DiVincenzo, Phys. Rev. A **57**, 120 (1998).
2. B. E. Kane, Nature **393**, 133 (1998).
3. М. И. Дьяконов, В. И. Перель, *Оптическая ориентация*, под ред. Б. П. Захарчени, Ф. Майера, Наука, Л. (1989).
4. A. V. Khaetskii, D. Loss, and L. Glazman, Phys. Rev. Lett. **88**, 186802 (2002); Phys. Rev. B **67**, 195329 (2003).
5. W. A. Coish, J. Fischer, and D. Loss, Phys. Rev. B **77**, 125329 (2008).
6. L. Cywinski, W. M. Witzel, and S. Das Sarma, Phys. Rev. Lett. **102**, 057601 (2009); Phys. Rev. B **79**, 245314 (2009).
7. J. Schliemann, A. V. Khaetskii, and D. Loss, Phys. Rev. B **66**, 245303 (2002); J. Phys.: Cond. Mat. **15**, R1809 (2003).
8. V. V. Dobrovitski and H. A. De Raedt, Phys. Rev. E **67**, 056702 (2003).
9. L. Cywinski, V. V. Dobrovitski, and S. Das Sarma, Phys. Rev. B **82**, 035315 (2010).
10. F. H. L. Koppens, K. C. Nowack, and L. M. K. Vandersypen, Phys. Rev. Lett. **100**, 236802 (2008).
11. H. Bluhm, S. Foletti, I. Neder, M. Rudner, D. Mahalu, V. Umansky, and A. Yacoby, Nat. Phys. **7**, 109 (2011).