

УДК 621.38

О. Баужа^{1*}, О. Воскобойніков²,
О.Третьак¹

Вплив спін-орбітальної взаємодії на намагніченість квантових точок

В роботі представлені теоретичні розрахунки впливу спін-орбітальної взаємодії на намагніченість електронів в мало розмірних квантових точках. Отримані нами характеристики демонструють незвичну поведінку при температурі рівній нулю. Різкі зміни намагніченості при низьких магнітних полях пов'язані з перетином енергетичних рівнів електронів. Ці перетини виникають за рахунок спін-орбітальної та електрон-електронної взаємодії. Детальні розрахунки проведені для InAs та InSb квантових точок демонструють збільшення парамагнетизму цих точок.

Ключові слова: квантові точки, спін-орбітальна взаємодія, електрон-електронна взаємодія, намагніченість.

O. Bauzha^{1*}, O. Voskobyonikov²,
O.Tretyak¹

Influence of spin-orbit interaction on quantum dots magnetization.

We present a theoretical study of the effect of the spin-orbit interaction on the electron magnetization of small semiconductor quantum dots. Those characteristics demonstrate quite interesting behavior at zero temperature. The abrupt changes of the magnetization at low magnetic fields are attributed to the alternative crossing between the spin-split electron levels in the energy spectrum, essentially due to the spin-orbit and electron-electron interaction. Detailed calculation using parameters of InAs and InSb semiconductor quantum dot demonstrates an enhancement of paramagnetism of the dots.

Key Words: quantum dots, spin-orbit interaction, electron-electron interaction, magnetization.

¹ Kyiv Taras Shevchenko University, 64 Volodymirska st., 01033 Kyiv, Ukraine

² National Chiao Tung University, 1001 Ta Hsueh Rd., Hsinchu 300, Taiwan

*E-mail: asb@univ.kiev.ua

1. Вступ

Внаслідок покращення нанотехнологій стало можливим створювати системи квантових точок, що відрізняються одна від одної кількістю точок та величиною хімічного потенціалу в них. Це зробило актуальним ретельне вивчення енергетичного спектру електронів у різноманітних квантових точках [1,2]. Для магнітних квантових точок також важливими є дослідження процесів намагнічування, які інтенсивно проводилися протягом останнього десятиліття [3-12]. Ці дослідження, по-перше, надають важливу інформацію про спінову динаміку атомних кластерів в зовнішньому магнітному полі, й, по-друге, утворюють науковий базис для подальшого розвитку нової галузі електроніки – спінтроніки [13-16]. З її точки зору спінові стани електронів в квантових точках розглядаються як елементи, що роблять можливим реалізацію qubit-масивів пам'яті в квантових комп'ютерах [17]. Це вимагає вивчення магнітних властивостей

квантових точок для ефективного керування їх спіновим станом і подальшого використання у промислових наноструктурах.

Мета даної роботи полягає у вивченні впливу спін-орбітальної взаємодії на магнітні властивості квантових точок в слабкому магнітному полі. В роботі було розглянуто намагніченість циліндричних квантових точок з параболічним обмежуючим потенціалом за наявності спін-орбітальної (SO) та електрон-електронної взаємодії. Такий розгляд дозволив описати властивості малих квантових точок у напівпровідниках. Більш детальні розрахунки виконані для напівпровідника InAs та InSb. Показано, що отримані характеристики намагніченості демонструють дуже цікаву поведінку в області низьких температур та малих магнітних полів.

2. Загальний розгляд проблеми

Спін-орбітальна взаємодія відіграє велику роль у формуванні електронного спектру напівпровідникових наноструктур $A^{III}-B^V$ [18,19]. Навіть в разі симетричної потенціальної ями для електронів, ця взаємодія спричиняє спінове виродження в нульовому магнітному полі. Це змінює електронні властивості напівпровідникової наноструктури [20-25].

Ефективний параболічний потенціал для однієї частинки гарно описує спостережені на експерименті властивості квантових точок з невеликою кількістю електронів [26-27]. Магнітне поле, прикладене вздовж осі симетрії точки, змінює електронні енергетичні рівні та призводить до виникнення багатьох цікавих фізичних ефектів. Поведінка енергетичних рівнів та термодинамічні властивості параболічних квантових точок в магнітних полях вже була досліджена експериментально [4,6,11,12]. Нещодавно явище спінового розщеплення було теоретично передбачено для параболічного потенціалу квантової точки з параметрами, що притаманні напівпровідникам InSb та InAs [25]. Спін-орбітальне розщеплення призводить до перетину енергетичних рівнів в разі прикладення слабкого зовнішнього магнітного поля (аналог ефекту Пашена-Бака).

Ми вирішуємо рівняння Кона-Шема чисельно для двовимірної параболічної квантової точки [35]:

$$\left[H_1 + \frac{e^2}{\kappa} \int \frac{w(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}' + \frac{\delta E_{xc}(w, \zeta)}{\delta w^\sigma(\mathbf{r})} \right] \times \psi_{n,l}^\sigma(\mathbf{r}) = \varepsilon_{n,l}^\sigma \psi_{n,l}^\sigma(\mathbf{r}), \quad (1)$$

$$w(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma} w^\sigma(\mathbf{r}) = \sum_{\sigma} \sum_{n,l} |\psi_{n,l}^\sigma(\mathbf{r})|^2, \quad (2)$$

де H_1 - гамільтоніан одного електрона з врахуванням SO взаємодії, κ - діелектрична проникність, $w(\mathbf{r})$ - функціонал густини.

Другий та третій доданки рівняння (1) відповідають за електрон-електронну взаємодію. Використаємо наближення локальної густини, та

запишемо $\zeta(\mathbf{r})$ - локальну спінову поляризацію та E_{xc} обмінно-кореляційна енергію[35,36]:

$$E_{xc} = \int w(\mathbf{r}) \varepsilon_{xc}[w(\mathbf{r}), \zeta(\mathbf{r})] d\mathbf{r}, \quad (3)$$

$$\zeta(\mathbf{r}) = \frac{w^\uparrow(\mathbf{r}) - w^\downarrow(\mathbf{r})}{w(\mathbf{r})}, \quad (4)$$

де $\varepsilon_{xc}[w(r), \zeta(r)]$ обмінно-кореляційна енергія, що приходиться на одну частинку однорідного спін-поляризованого газу. В свою чергу $\varepsilon_{xc}[w(r), \zeta(r)]$ розглядається як сума обмінної та кореляційної енергії [36]:

$$\varepsilon_{xc}[w(\mathbf{r}), \zeta(\mathbf{r})] = \varepsilon_x[w(\mathbf{r}), \zeta(\mathbf{r})] + \varepsilon_c[w(\mathbf{r}), \zeta(\mathbf{r})] \quad (5)$$

При врахуванні електрон-електронної взаємодії обмежимося обмінною енергією. Для двовірного електронного газу обмінна енергія набуває вигляду

$$\varepsilon_x[w, \zeta] = -\frac{4}{3r_B} \sqrt{\frac{2w}{\pi}} \left[(1 + \zeta)^{3/2} + (1 - \zeta)^{3/2} \right] \quad (6)$$

де r_B -радіус Бора.

Рівняння 3,4,6 записані в атомних одиницях.

Магнітне поле \mathbf{B} прикладене вздовж осі симетрії точки. Запишемо гамільтоніан H_1 в циліндричній системі координат $\{\rho, \phi\}$ [28]:

$$H_1 = -\frac{\hbar^2}{2m(E)} \left[\frac{\partial}{\rho \partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] - \frac{i}{2} m \omega_c(E, B) \frac{\partial}{\partial \phi} \quad (7)$$

$$+ \frac{1}{8} m(E) \omega_c^2(E, B) \rho^2 + V_c(\rho) + V_{so}^R(\rho, \phi) + \frac{1}{2} \sigma_z \mu_B g(E) B,$$

де

$$V_c(\rho) = \frac{1}{2} m(E) \omega_0^2 \rho^2, \quad (8)$$

– ефективний параболічний потенціал, $\hbar \omega_0$ - характерна енергія зв'язку електрона у квантовій точці, σ_z – матриця Паулі. Ефективна маса електрона визначається формулою [22,28]

$$\frac{1}{m(E)} = \frac{1}{m(0)} \frac{E_g (E_g + \Delta)}{(3E_g + 2\Delta)} \left[\frac{2}{E + E_g} + \frac{1}{E + E_g + \Delta} \right], \quad (9)$$

де E – енергія електрона в зоні провідності, $m(0)$ ефективна маса електрона біля дна зони провідності, E_g та Δ ширина забороненої зони та смуга розщеплення спін-орбітальної взаємодії відповідно,

$$\omega_c(E, B) = \frac{eB}{m(E)}$$

– циклотронна частота електрона,

$$g(E) = 2 \left[1 - \frac{m_0}{m(E)} \frac{\Delta}{3(E_g + E) + 2\Delta} \right] \quad (10)$$

– ефективний фактор Ланде [29], $\mu_B = e\hbar/2m_0$ – магнетон Бора, e та m_0 заряд та маса вільного електрона, відповідно.

Складова Рашба у спін-орбітальній взаємодії визначається формулою:

$$V_{so}^R(\rho, \phi) = \sigma_z \alpha \frac{dV_c(\rho)}{d\rho} \left(k_\phi + \frac{e}{2\hbar} B\rho \right), \quad (11)$$

де $k_\phi = -i(1/\rho)\partial/\partial\phi$, α – параметр спін-орбітального зв'язку, введений Рашбою (див. [22,24,30,31]). При впливі зовнішнього електричного поля $V_c(\rho)$ замінюється на суму ефективний параболічний потенціалу з потенціалом зовнішнього поля. Розглянемо випадок коли зовнішнє електричне поле відсутнє.

Розглянемо вплив SO взаємодії на магнітні властивості системи з квантовою точкою. При нульовій температурі, намагніченість шукаємо у вигляді [10]:

$$M = - \frac{\partial E_{tot}}{\partial B} \quad (12)$$

де E_{tot} - повна енергія системи для даної кількості електронів – N , що визначається так:

$$E_{tot}(N) = \sum_{n,l,\sigma} \varepsilon_{n,l}^\sigma + \frac{e^2}{2\kappa} \int \frac{w(\mathbf{r})w(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d\mathbf{r}d\mathbf{r}' - \sum_{\sigma} \int w^\sigma(\mathbf{r}) \frac{\delta E_{xc}(w, \zeta)}{\delta w^\sigma(\mathbf{r})} d\mathbf{r} + E_{xc} \quad (13)$$

3. Магнітні властивості квантових точок у напівпровідниках InAs та InSb.

Розв'язання рівняння (1) проводиться методом самоузгодженого поля, тобто послідовним наближенням, у якому при вирішенні рівняння для даного електрона стани інших електронів вважається відомим. Отриманий розв'язок потім використовується для уточнення станів інших електронів і створеного ними потенціалу. Використовувалась схема Бройдена самоузгоджених розрахунків.

Для InAs квантових точок обираємо $m(0)=0.04m_0$ (параметр настройки [33]), $E_g=0.42\text{eV}$, $\Delta=0.38\text{eV}$, $\alpha=1.1\text{nm}^2$, $\hbar\omega_0=0.019\text{eV}$ [25,28,32]). Для InSb квантових точок обираємо $m(0)=0.014m_0$, $E_g=0.24\text{eV}$, $\Delta=0.81\text{eV}$, $\alpha=5.0\text{nm}^2$, $\hbar\omega_0=0.025\text{eV}$ [25,28]. Розрахуємо намагніченість точки.

Для випадку, коли в точці 2,6 електронів рис 1a,b (закрита зовнішня оболонка) сумарний орбітальний та спіновий моменти дорівнюють нулю. Отже, при нульовому магнітному полі намагніченість рівна нулю. Що співпадає з теоретичними розрахунками. При збільшенні зовнішнього магнітного поля намагніченість зменшується. При 3-х електронах у

квантовій точці (рис 1b) зміна магнітного поля приводить до простих змін намагніченості. Для точки з чотирма та п'ятьма електронами результати виявляються набагато цікавішими.

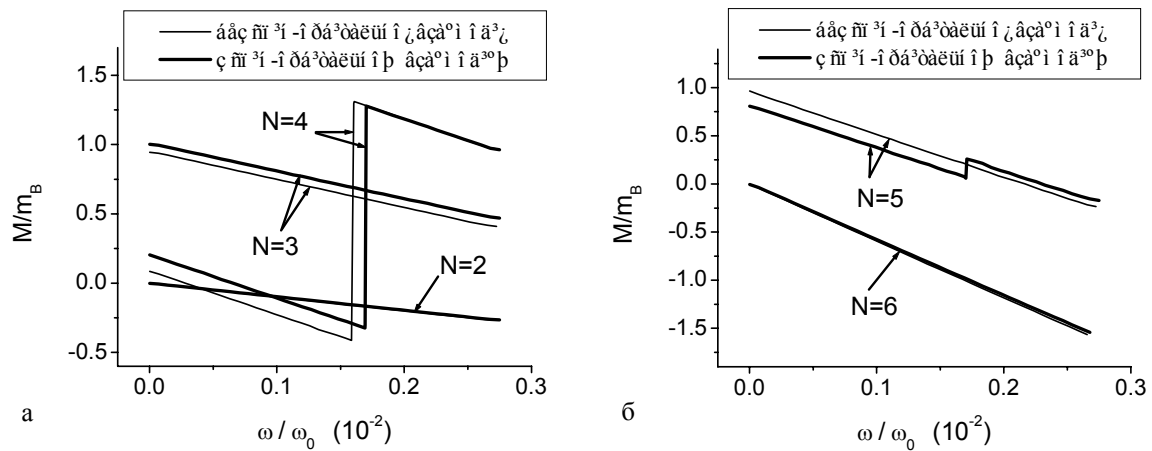


Рис 1. Залежність намагніченості InAs квантових точок від магнітного поля, при $T=0K$. Розрахунки проведені для випадків $N=2-6$ електронів в квантовій точці.

Як видно з рис 1a навіть у відсутності SO взаємодії (враховуючи тільки електрон електронну взаємодію) ми маємо стрибок намагніченості в квантових точках з 4-ма електронами. Стрибок пов'язаний з перетином енергетичних рівнів в квантових точках при збільшенні магнітного поля. Однак, як видно з рисунку, SO взаємодія зміщує цей стрибок в область більших магнітних полів. Для 5-и електронів в точці рис 1б електрон-електронна взаємодія не приводить до стрибка намагніченості. Тільки при врахуванні SO взаємодії маємо ефект перетину енергетичних рівнів, отже, і стрибок намагніченості. Аналогічно поведуть себе криві і для InSb квантової точки рис 2.

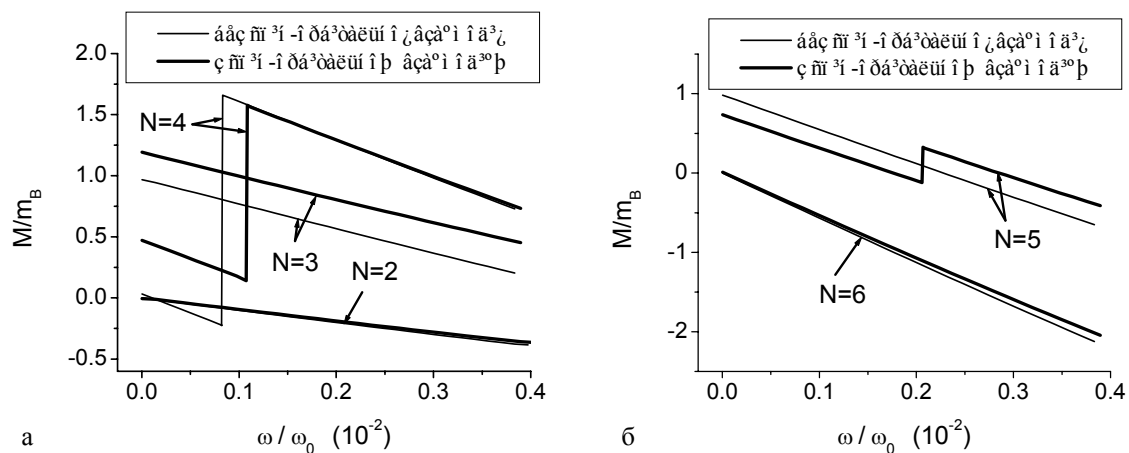


Рис 2. Залежність намагніченості InSb квантових точок від магнітного поля, при $T=0K$. Розрахунки проведені для випадків $N=2-6$ електронів в квантовій точці.

4. Обговорення результатів та висновки

Розраховано енергії основного стану та намагніченість квантових точок для випадків заповнення квантових точок 2-6 електронами при нульовій температурі. При розрахунках було враховано електрон-електронну взаємодію та спін-орбітальної взаємодію в представленні Рашба. Стрибки намагніченості є наслідком перетину енергетичних електронних рівнів. Як було показано, причиною перетину можуть бути як електрон-електронна так і спін-орбітальна взаємодія. Ефект перетину електронних рівнів за рахунок спін-орбітальної взаємодії відомий з атомарної теорії спектрів (ефект Пашена-Бака [34]). Тому описані вище результати мають прозоре фізичне значення, але повинні бути перевірені.

На відміну від звичайних атомних систем квантові точки мають переваги - можливість керування магнітними властивостями за допомогою зовнішнього електричного поля. Зміна електричного поля призводить до зміни SO взаємодії, що в свою чергу змінює і магнітні властивості квантової точки. Тому спін - орбітальну взаємодію можна розглядати як інструментарій для керування магнітними властивостями в точках при низьких температурах.

Був знайдений аналог ефекту Пашена-Бака для точок з частково заповненими електронними оболонками. Описані вище особливості $A^{III}-B^V$ квантових точок можуть бути корисні в майбутньому для досліджень в напрямі спінтроніки.

Література

- [1] D. Bimberg, Semiconductors 33, 951 (1999).
- [2] L. P. Kouwenhoven, D. G. Austing, and S. Tarucha, Rep. Prog. Phys. 64, 701 (2001).
- [3] P. A. Maksym, T. Chakraborty, Phys. Rev. B 45, 1947 (1992).
- [4] M. Wagner, U. Merkt, and A. V. Chaplik, Phys. Rev. B 45, 1951 (1992).
- [5] Jean-Jacques S. De Groote, J. E. M. Hornos, and A. V. Chaplik, Phys. Rev. B 46, 12773 (1992).
- [6] D. Yoshioka and H. Fukuyama, J. Theor. Soc. Jap. 61, 2368 (1992).
- [7] B. L. Altshuler, Y. Gefen, Y. Imry, and G. Montambaux, Phys. Rev. B 47, 10335 (1993).
- [8] T. Swahn, E. N. Bogachev, Yu. M. Galperin, M. Jonson, and R. I. Shekhter, Phys. Rev. Lett. 73, 162 (1994).
- [9] K. Tanaka, Ann. Phys. 268, 28 (1998).
- [10] W. C. Tan and J. C. Inkson, Phys. Rev. B 60, 5626 (1999).
- [11] I. Magnusdottir and V. Gudmundsson, Phys. Rev. B 61, 10229 (2000).

- [12] Y. P. Krasny, N. P. Kovalenko, U. Krey, and L. Jacak, *J. Phys.: Cond. Matter* 13, 4341 (2001).
- [13] G. A. Prinz, *Science*, 282, 1660 (1998).
- [14] B. E. Kane, *Nature*, 393, 133 (1998).
- [15] D. D. Awschalom, J. M. Kikkawa, *Phys. Today* 52, 33 (1999)
- [16] S. Das Sarma, J. Fabian, X. Hu, and I. Zutic, *Solid State communications* 119, 207 (2001).
- [17] D. Loss and D. P. DiVincenzo, *Phys. Rev. A* 57, 120 (1998).
- [18] G. Dresselhaus, *Phys. Rev.* 100, 580 (1955).
- [19] Yu. A. Bychkov and E. I. Rashba, *J. Phys. C* 17, 6039 (1984).
- [20] D. Richards and B. Jusserand, *Phys. Rev. B* 59, R2506 (1999).
- [21] C. M. Hu, J. Nitta, T. Akazaki, H. Takayanagai, J. Osaka, P. Pfeffer, and W. Zawadzki, *Phys. Rev. B* 60, 7736 (1999).
- [22] E. A. de Andrada e Silva, G. C. La Rocca, and F. Bassani, *Phys. Rev. B* 55, 16 293 (1997).
- [23] A. Voskoboynikov, Shiue Shin Liu, C. P. Lee and Tretyak, *J. App. Phys.* 87, 1 (2000).
- [24] A. V. Moroz and C. H. W. Barnes, *Phys. Rev. B* 61, R2464 (2000), *Phys. Rev. B* 60, 14 272 (2000).
- [25] O. Voskoboynikov, C. P. Lee, and O. Tretyak, *Phys. Rev. B* 63, 165306 (2001).
- [26] V. Fock, *Z. Phys*, 47, 446 (1928).
- [27] P. A. Maksym, H. Imamura, G. P. Mallon, and H. Aoki, *J. Phys.: Condens. Matter* 12, R299 (2000).
- [28] G. Bastard, *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures* (Les Edition de Physique, Les Ulis, 1990).
- [29] L. M. Roth, B. Lax, and S. Zwerdling, *Phys. Rev.* 114, 90 (1959).
- [30] L. I. Magaril, D. A. Romanov and Chaplik, *Zh. Eks. Teor. Fiz.* 113,1411 (1998)[*JETP* 86, 771 (1998)].
- [31] L. I. Magaril and Chaplik, *JETP Lett.* 64, 460 (1996), *Zh. Eks. Teor. Fiz.* 115, 1478 (1999)[*JETP* 88, 815 (1999)].
- [32] M. A. Cusack, P. R. Briddon, and M. Jaros, *Phys. Rev. B* 54, 2300 (1996).
- [33] Guang-Hong Chen and M. E. Raikh, *Phys. Rev. B* 60, 4826 (1999).
- [34] I. I. Sobelman, *Atomic Spectra and Radiative Transitions* (Springer-Verlag, Berlin, 1991
- [35] Kenji Hirose and Ned S. Wingreen, *Phys. Rev. B* 59, 4604 (1999).
- [36] B. Tanatar and D.M. Ceperley, *Phys. Rev. B* 39, 5005 (1989).