

**Магнітні властивості квантових точок із врахуванням спін-орбітальної взаємодії.**

**Зубков В.В., Бауза О.С.**

*В роботі представлені теоретичні розрахунки впливу спін-орбітальної взаємодії на намагніченість та магнітну сприйнятливість електронів в малорозмірних квантових точках. Отримані характеристики демонструють стрибкоподібну поведінку при наднизьких температурах. Різкі зміни намагніченості при малих магнітних полях пов'язані з перетином енергетичних рівнів електронів. Ці перетини виникають за рахунок спін-орбітальної взаємодії. Детальні розрахунки проведені для InAs квантових точок демонструють зміну діамагнітних властивостей на парамагнітні, а також згладжування характеристик намагніченості та магнітної сприйнятливості із збільшенням температури.*

*Ключові слова: квантові точки, спін-орбітальна взаємодія, унітарна трансформація, намагніченість, магнітна сприйнятливість.*

## **1. Вступ**

На сьогоднішній день нанотехнології досягли такого рівня, що дозволяють створювати системи квантових точок (КТ), які можуть відрізнятися одна від одної розміром, величиною хімічного потенціалу в них, кількістю точок в системі, тощо [1]. Отже проблема ретельного дослідження енергетичних спектрів у КТ стала більш актуальною. Також, в останні роки, достатньо жваво проводяться дослідження процесів намагнічування КТ [2]. Такі дослідження важливі для напрямку науки – спінтроники і проводяться з метою отримання інформації щодо спінових властивостей структур з КТ у зовнішньому магнітному полі.

Так існує можливість використання таких наносистем для створення qubit-масивів пам'яті у квантових комп'ютерах [3]. Отже дослідження енергетичного спектру в КТ можуть допомогти запропонувати принципи роботи нових приладів спінтроники.

Мета даної роботи полягає у дослідженні впливу спін-орбітальної (СО) взаємодії на намагніченість та магнітну сприйнятливість квантових точок в слабких магнітних полях. В даній роботі було розглянуто модель циліндричної квантової точки з параболічним обмежуючим потенціалом за наявності СО взаємодії. Використання методу унітарного перетворення

**Magnetic properties of quantum dots with spin-orbit interaction.**

**Volodymyr Zubkov, Oleksandr Bauzha**

*We present a theoretical study of the effect of the spin-orbit interaction on the electron magnetization and magnetic susceptibility of small semiconductor quantum dots. Those characteristics demonstrate interesting behaviour at a low but finite temperature. The strident 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 interaction. Detailed calculation using parameters of InAs semiconductor quantum dot demonstrates changes from diamagnetic to paramagnetic susceptibility and also smoothing magnetization and magnetic susceptibility characteristics with growth temperature.*

*Key Words: quantum dots, spin-orbit interaction, unitary transformation, magnetization, magnetic susceptibility.*

гамільтоніана, для розгляду такої моделі КТ, дозволило знайти енергетичні рівні в аналітичному вигляді. Розрахунки спектру, намагніченості та магнітної сприйнятливості проведені для напівпровідника InAs. Показано, що при малих магнітних полях існує перетин енергетичних рівнів, що в свою чергу призводить до стрибкоподібної зміни намагніченості.

## 2. Аналіз проблеми

СО взаємодія відіграє суттєву роль при формуванні спектру електрону в напівпровідникових структурах типу  $A^{III}-B^V$ . Ця взаємодія знімає спінове виродження в нульовому магнітному полі.

Ми розглядаємо квантову точку сформовану у двовимірному електронному газі, що обмежений вздовж осі  $z$ , з параболічним ефективний потенціалом:

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

Стационарне рівняння Шредінгера без врахування спин-орбітальної взаємодії з потенціалом такого вигляду має аналітичний розв'язок[1]. При врахуванні СО взаємодії, для знаходження аналітичного розв'язку необхідно використати унітарне перетворення[4,5]. Магнітне поле прикладається вздовж осі симетрії квантової точки.

Гамільтоніан такої системи в циліндричних координатах  $\{\rho, \varphi\}$  має наступний вигляд[6]:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m(E)} \left[ \frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] - \frac{i}{2} \hbar \omega_c \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{m(E)}{8} \omega_c^2 \rho^2 + V_c + H_{Dress} + \frac{1}{2} \Sigma_z \mu_B g(E) B \quad (2)$$

де

$$H_{Dress} = \lambda_D \left[ \Sigma_\varphi \left( k_\varphi + \frac{e}{2\hbar} B \rho \right) + \Sigma_\rho k_\rho \right], \quad (3)$$

– спин-орбітальна взаємодія в представленні Дресельхауса[7, 8], де

$$k_\varphi = -\frac{i}{\rho} \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad k_\rho = -i \cdot \frac{\partial}{\partial \rho}. \quad (4)$$

– проекції оператора хвильового числа на осі  $\varphi$  та  $\rho$ ,  $\lambda_D$  – параметр Дресельхауса, який визначається наступним чином:

$$\lambda_D = \gamma_c \cdot \left( \frac{\pi}{z_0} \right)^2, \quad (5)$$

де  $\gamma_c$  – константа матеріалу[9], визначається для напівпровідника з якого утворена квантова точка,  $z_0$  – висота квантової точки;

$\Sigma_\rho, \Sigma_\varphi, \Sigma_z$  – матриці Паулі в циліндричних координатах[10],  $\omega_c = eB/m(E)$  – циклотронна частота,  $\mu_B = e\hbar/2m_0$  – магнетон Бора.

Для ефективної маси використовується вираз[1]:

$$\frac{1}{m(E)} = \frac{1}{m(0)} \cdot \frac{E_g(E_g + \Delta)}{3E_g + 2\Delta} \cdot \left[ \frac{2}{E + E_g} + \frac{1}{E + E_g + \Delta} \right], \quad (6)$$

де  $m(0)$  – ефективна маса електрона на дні зони провідності,  $E_g$  – ширина забороненої зони напівпровідника,  $\Delta$  – спін-орбітальне розщеплення валентної зони в напівпровіднику.

$g$ - фактор задається формулою[1]:

$$g(E) = 2 \left[ 1 - \frac{m_0}{m(E)} \cdot \frac{\Delta}{3(E_g + E) + 2\Delta} \right]. \quad (7)$$

Стаціонарне рівняння Шредінгера з таким гамільтоніаном немає аналітичного розв'язку. Тому використовуємо унітарну трансформацію[4,5], в результаті чого отримуємо трансформований гамільтоніан:

$$\tilde{H} = U^{-1} H U. \quad (8)$$

Візьмемо оператор  $U$  у такому вигляді

$$U = \exp(-i\lambda_D G), \quad (9)$$

де  $G = \frac{m}{\hbar^2} \rho \Sigma_\rho$ . Тоді розклавши трансформований гамільтоніан за малим параметром  $\lambda_D$  ( $\lambda_D \ll 1$ ) в ряд Тейлора і припускаючи, що  $H_{Dress} \gg H_{Zejm}$ , тоді відкинувши члени вищих порядків отримуємо:

$$\hat{H} = H + i\lambda_D [G, H] + \frac{i^2 \lambda_D^2}{2!} [G, [G, H]] + O(\lambda_D^3), \quad (10)$$

де  $[G, H]$  – комутатор. Усіма членами вищих порядків ( $O(\lambda_D^3)$ ) нехтуємо.

Пропускаючи математичні викладки щодо знаходження комутаторів отримаємо вираз для трансформованого гамільтоніана:

$$\begin{aligned} \tilde{H} = & -\frac{\hbar^2}{2m(E)} \left[ \frac{1}{\rho} \cdot \frac{\partial}{\partial \rho} \left( \rho \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] - \frac{i}{2} \hbar \omega_C \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{m(E)}{8} \omega_C^2 \rho^2 + \frac{m(E)}{2} \omega_0^2 \rho^2 - \\ & - \frac{im\lambda_D^2}{\hbar^2} \Sigma_Z \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} + \frac{me\lambda_D^2}{2\hbar^3} B \rho^2 \Sigma_Z + \frac{1}{2} \mu_B g B \Sigma_Z - \frac{m\lambda_D^2}{\hbar^2} \end{aligned} \quad (11)$$

Вибираючи хвильову функцію в такому вигляді[1]:

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \cdot \Phi(\varphi) \cdot R_{n,l,\Sigma}(\rho), \quad (12)$$

і розв'язуючи стаціонарне рівняння Шредінгера для трансформованого гамільтоніана отримаємо енергетичний спектр[1]:

$$E_{n,l,\Sigma} = \hbar \Omega_\Sigma(E_{n,l,\Sigma}, B) \cdot (2n + |l| + 1) + \frac{\hbar l \omega_C(E_{n,l,\Sigma}, B)}{2} + \Sigma_Z \cdot \left( \frac{m\lambda_D^2 l}{\hbar^2} + \frac{\mu_B g B}{2} \right) - \frac{m\lambda_D^2}{\hbar^2} \quad (13)$$

Величина намагніченості, для нульової температури, визначається наступним чином [10]:

$$M = \sum_{n,l,s} \left( -\frac{\partial E_{n,l,\Sigma}}{\partial B} \right), \quad (14)$$

При ненульовій температурі вираз для намагніченості матиме наступний вигляд:

$$M = \sum_{n,l,s} \left( -\frac{\partial E_{n,l,\Sigma}}{\partial B} \right) \cdot f(E_{n,l,\Sigma} - \xi), \quad (15)$$

де  $f(E)$  – функція розподілу Фермі-Дірака,  $\xi$  – хімічний потенціал заданої системи, який визначається з рівності:

$$N = \sum_{n,l,s} f(E_{n,l,\Sigma} - \xi), \quad (16)$$

де  $N$  – кількість електронів в квантовій точці.

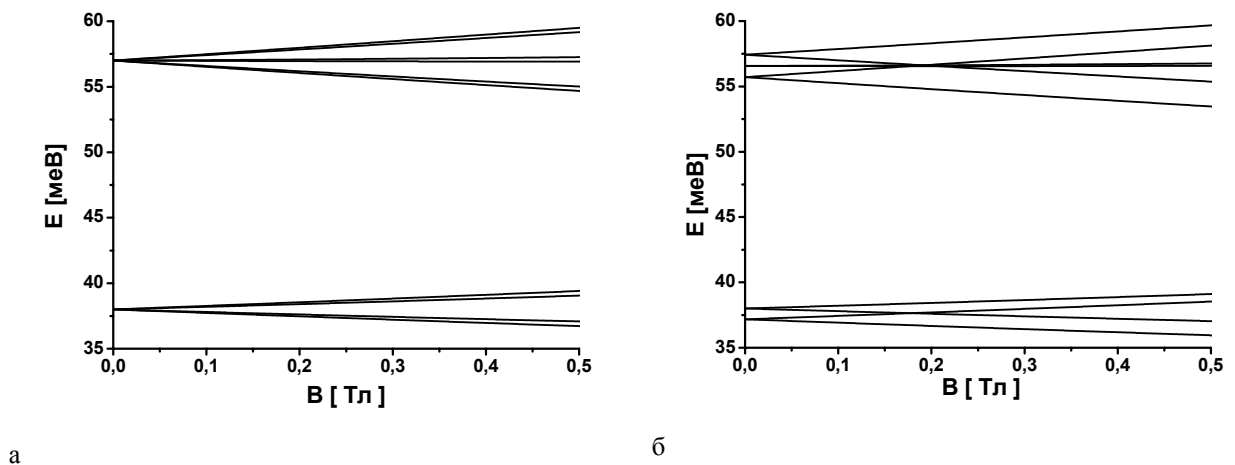
Магнітна сприйнятливості знаходиться за наступною формулою:

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial B}. \quad (17)$$

### 3. Енергетичний спектр та магнітні властивості квантових точок у напівпровіднику InAs

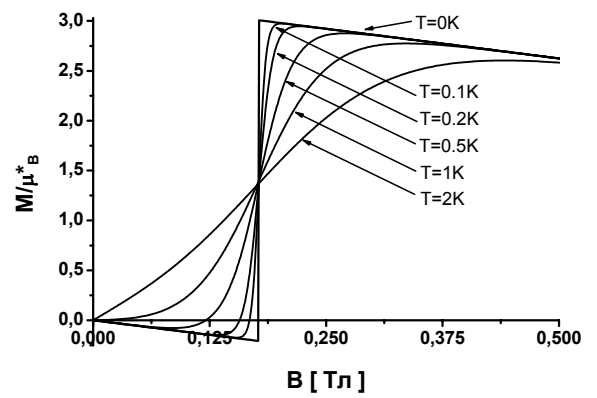
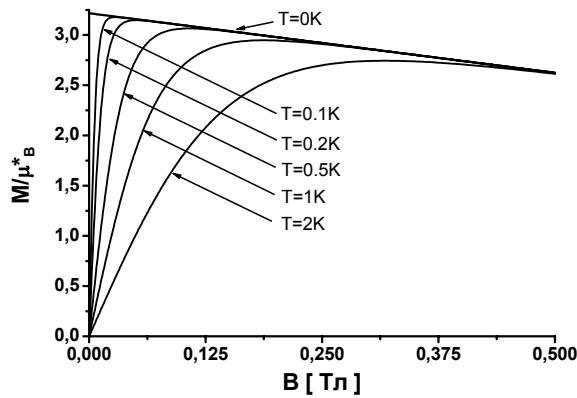
Для розрахунків використовувалися такі параметри напівпровідника InAs:  $m(0)/m_0 = 0.04$ ,  $E_g = 0.42$  eВ,  $\Delta = 0.38$  eВ, характерна енергія зв'язку в КТ –  $\hbar\omega_0 = 0.019$  eВ,  $\gamma_c = 130$  eВ  $\text{\AA}^3$  [10]. Товщина КТ  $z_0 = 6$  нм, середній радіус  $r_0 \approx 19$  нм.

На рисунку 1-а зображено залежність енергетичного спектру від прикладеного магнітного поля без спіно-орбітальної взаємодії. На 1-б наведено ту саму залежність але із врахуванням спіно-орбітальної взаємодії.



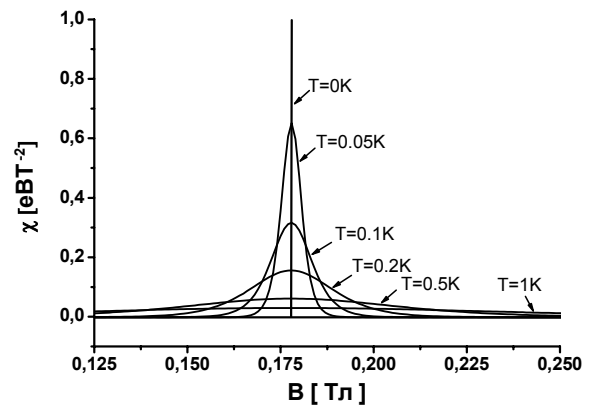
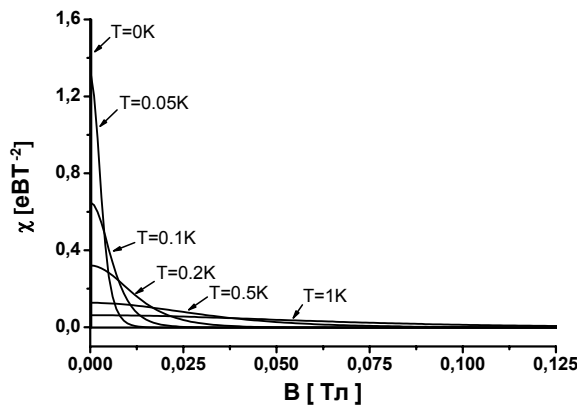
**Рис. 1** Енергетичний спектр без (а) та зі спіно-орбітальною взаємодією (б)

На Рис. 2 представлені залежності намагніченостей та магнітної сприйнятливості від магнітного поля для квантової точки з 4-ма електронами.



а

в



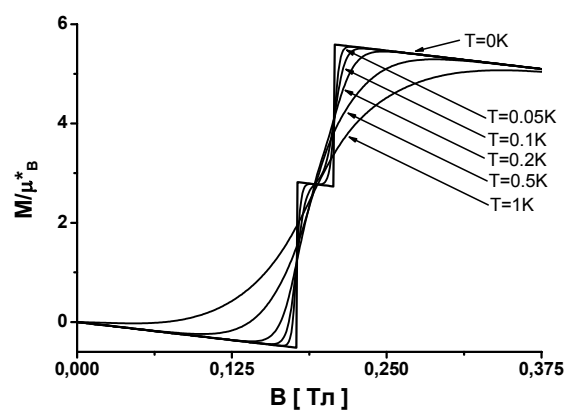
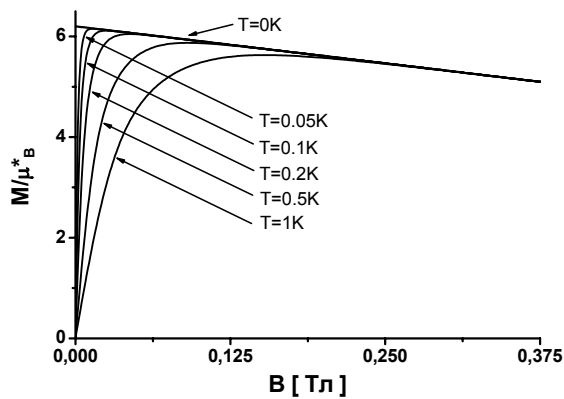
б

г

**Рис. 2** Намагніченість КТ без СО та зі СО взаємодією – (а) та (в) відповідно та магнітна сприйнятливості КТ без СО та зі СО взаємодією – (б) та (г) відповідно при заповненні 4-ма електронами, де за  $\mu_B^*$  позначено ефективний магнетон Бора  $\mu_B^* = e\hbar/2m(0)$ .

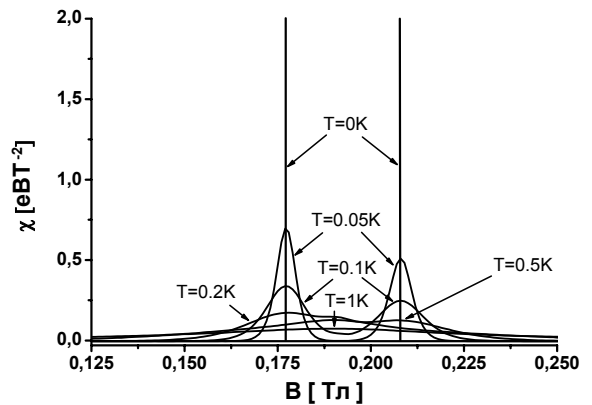
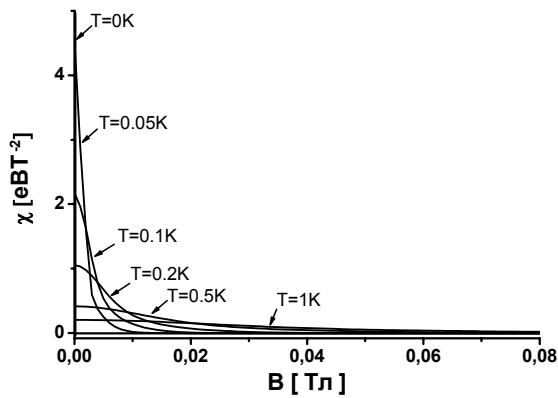
Для такої системи загальна намагніченість зі збільшенням магнітного поля зменшується. При врахуванні СО взаємодії з'являється стрибок намагніченості та відповідний йому стрибок магнітної сприйнятливості. Ефект зменшується при збільшенні температури.

На Рис. 3 зображено залежності намагніченості та магнітної сприйнятливості від магнітного поля при заповненні 8-ма електронами.



а

в



б

г

**Рис. 3** Намагніченість КТ без СО та зі СО взаємодією – (а) та (в) відповідно та магнітна сприйнятливості КТ без СО та зі СО взаємодією – (б) та (г) відповідно при заповненні 8-ма електронами

При заповненні квантової точки 8-ма електронами намагніченість має вигляд двох стрибків, це пов'язано з перетином 3-х енергетичних рівнів. Відповідно картина магнітної сприйнятливості має два піки.

Наявність такої подвійної ‘сходінки’ намагніченості залежить від товщини КТ. При зменшенні товщини КТ розщеплення рівнів збільшується і перетин енергетичних рівнів зсувається у бік більших магнітних полів, але за рахунок того що рівні розташовані щільно, полича намагніченості зменшується. Навпаки якщо збільшувати товщину КТ, СО розщеплення рівнів енергії зменшується і перетин відбувається при малих магнітних полях, при яких рівні також розташовані щільно, що також призводить до зменшення поличі намагніченості. Діапазон значень товщин КТ при яких замість одиничного стрибку спостерігається подвійна ‘сходінка’: мінімальна товщина –  $z_{0Min} \approx 4.4\text{нм}$ , максимальна товщина –  $z_{0Max} \approx 14.8\text{нм}$ .

Також стрибки намагніченості спостерігаються при заповненні КТ п'ятьма, дев'ятьма та десятьма електронами.

#### 4. Висновки

Розраховано енергетичні рівні, намагніченість та магнітну сприйнятливості для випадку заповнення квантової точки 4-ма та 8-ма електронами при нульовій та ненульових температурах. При розрахунках було враховано спин-орбітальну взаємодію в представленні Дресельхауса. Стрибки намагніченості та піки магнітної сприйнятливості є наслідком перетину енергетичних електронних рівнів.

В місцях перетину енергетичних рівнів КТ поводить себе як парамагнетик (магнітна сприйнятливості  $\chi > 0$ ), за відсутності перетинів вона поводить себе як діамагнетик. Величина стрибку намагніченості залежить від квантових чисел тих рівнів, які перетинаються, а саме при зміні спінового квантового числа стрибок найменший, при зміні орбітального квантового числа стрибок середній, а при зміні головного квантового числа стрибок найбільший.

КТ мають низку особливостей, а саме можливість керування енергетичним спектром й магнітними властивостями за допомогою зовнішнього електричного поля, або зміни товщини КТ.

### Література.

- [1] O. Voskoboynikov, O. Bauga, C. P. Lee, O. Tretyak, Magnetic properties of parabolic quantum dots in the presence of the spin-orbit interaction, *Journal of applied physics*, Volume 94, Number 9, (2003)
- [2] Фізичні основи спінової електроніки. О. В. Третяк, В. А. Львов, О. В. Барабанов, Київ, “Київський університет” 2002 р. - 315 с.
- [3] Квантовые компьютеры: надежды и реальность. Валиев К. А. Кокин А. А. Ижевск 2001 г. – 352 с.
- [4] Agusti Emperador and E Lipparini, Role of spin-orbit interaction in the chemical potential of quantum dots in a magnetic field, *Physical Review B*, Volume 70, 125302 (2004)
- [5] Manuel Valin-Rodriguez, Antonio Puente, and Llorenc Serra, Spin splitting and precession in quantum dots with spin-orbit coupling: The role of spatial deformation, *Physical Review B* 69, 085306 (2004)
- [6] Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, Теоретическая физика, том 3 Квантовая механика нерелятивистская теория, М., Наука, 1989 г. – 772 с.
- [7] G. Dresselhaus, *Phys. Rev.* **100**, 580, (1955)
- [8] G. E. Pikus, V. A. Marushchak, and A. N. Titkov, *Fiz. Tekh. Poluprovodn.* **22**, 185, 1988 [*Sov. Phys. Semicond.* **22**, 115, 1988]
- [9] W. Knap, C. Skierbiszewski, A. Zduniak, E. Litwin-Staszewska, D. Bertho, F. Kobbi, J. L. Robert, G. E. Pikus, F. G. Pikus, S. V. Iordanskii, V. Mosser, K. Zekentes, and Yu. B. Lyanda-Geller, *Phys. Rev. B* **53**, 3912, (1996)
- [10] O. Voskoboynikov, C. P. Lee, and O. Tretyak, Spin-orbit splitting in semiconductor quantum dots with parabolic confinement potential, *Physical Review B*, Volume 63, 165306 (2001)