

УДК 621.38

Баужа О.С., к.ф.-м.н., асистент

**Вплив спін-орбітальної взаємодії на
розщеплення енергетичних рівнів
електронів в InSb напівпровідникових
квантових точках**

Київський національний університет імені
Тараса Шевченка, 83000, м. Київ, пр-т.
Глушкова 4г,
e-mail: asb@mail.univ.kiev.ua

O.S. Bauzha, PhD.

**The influence of the spin-orbit interaction on
the splitting of energy levels of electrons in
InSb semiconductor quantum dots**

Taras Shevchenko National University of Kyiv,
83000, Kyiv, Glushkova st., 4g,

e-mail: asb@mail.univ.kiev.ua

У цій роботі проведено теоретичний аналіз впливу спін-орбітальної взаємодії (СО) на енергетичний спектр електронів в циліндричних напівпровідникових квантових точках (КТ). Розглянуто залежність енергетичних рівнів електронів від розміру квантової точки і прикладеного зовнішнього магнітного поля. Врахування складових Бичкова-Рашиби та Рашиби спін-орбітальної взаємодії приводить до виникнення спінового розщеплення електронних енергетичних рівнів. Спінове розщеплення електронних станів з ненульовим орбітальним моментом електрона продемонстровано на прикладі InSb квантової точки в нульовому магнітному полі. Досліджено перетини рівнів енергії електрона з однаковим орбітальним моментом і різними спіновими моментами в ненульовому магнітному полі.

Ключові спін-орбітальна взаємодія, квантова точка, електронний енергетичний рівень.

The theoretical analysis of the effect of spin-orbit (SO) interactions on the electron energy spectrum of cylindrical semiconductor quantum dots is the aim of presented papers. The dependence of energy levels on size of the dots and the applied external magnetic field is studied. Contributions the Bychkov-Rashba term and the Rashba term of the spin-orbit interactions to the spin splitting of the electron energy states are discussed. The spin splitting of electron states with nonzero angular momentum is demonstrated theoretically for InSb quantum dots at zero magnetic field. It was find a "crossing" of the electron energy states with the same angular momentum and different spin polarizations in a nonzero magnetic field.

The results demonstrate competition two components of the spin-orbit interaction. Rashba term has a greater impact in the reduction of the size of the quantum dot. The value of Bychkov-Rashba term can be easily controlled by external electric field. I was demonstrated the ability to control the electronic spectrum of the quantum dot using external electric field applied along the axis of symmetry of the quantum dot in this work.

Keywords: spin-orbit interaction, quantum dot, electron energy states.

Статтю представив д.т.н. Погорілий С.Д.

Експериментальні та теоретичні дослідження спінзалежних явищ в низькорозмірних структурах та спін транспорту в напівпровідникових квантових гетероструктурах привернули значну увагу в останні роки [1-2]. Зростаючий інтерес до цієї теми пов'язаний із двома фактами. По-перше, прогрес в технології напівпровідників зробив можливим створити структури, що чутливі до електронних спінів. Такими пристроями спінтроники можна керувати за допомогою поляризації спінів електронів [1-2]. По-друге, можна використовувати досить

загальний фізичний підхід для опису спінзалежних явищ у напівпровідникових квантових малорозмірних структурах [3].

Спін електрона може істотно вплинути на електричні та магнітні властивості квантових структур. Серед можливих спінзалежних впливів слід виділити взаємодію між орбітальним та спіновим моментом електрона [3-5].

Незважаючи на релятивістську природу СО взаємодії, вона може грати суттєву роль в зонній структурі багатьох напівпровідників. Навіть в симетричному обмежуючому потенціалі СО

взаємодія частково знімає виродження енергетичних рівнів електронів в напівпровідникових квантових ямах [3].

Очевидно, що спін-орбітальна взаємодія в значній мірі залежить від квантової геометрії системи. Удосконалення напівпровідникової технології зробило можливим легко змінювати геометричні форми квантових структур [6-7]. Тому спін-залежні явища в цих структурах є цікавими для дослідників.

Метою даної роботи є розгляд впливу СО взаємодії на електронні енергетичні стани в квантових точках. Спін-орбітальна взаємодія в роботі описується двома складовими гамільтониану електрона, що знаходиться в КТ. Одна з них відома як складова Рашби СО взаємодії [8]. Друга була вперше розглянута Бичковим та Рашбою для електронів в 2D електронному газі [9]. Кулонівською взаємодією

між електронами для простоти нехтуємо. Дане спрощення суттєво не змінить основних висновків про вплив СО взаємодії на властивості електронів, що перебувають в квантовій точці.

При розрахунках електронних спектрів вважаємо, що електрони знаходяться в квазі-двовимірній квантовій точці. Дана модель може успішно описати електронні властивості круглих дискових квантових точок [3-4] (штучних атомів).

Для опису квантової точки будемо використовувати наступну математичну модель:

2D-електронний газ обмежений параболічним потенціалом, в якості форми квантової точки вибрано циліндр. Рух електронів уздовж осі Z обмежено нескінченно глибокою потенціальною ямою (рис. 1 с). Величина нахилу дна ями вздовж осі Z залежить від величини прикладеного зовнішнього електричного поля.

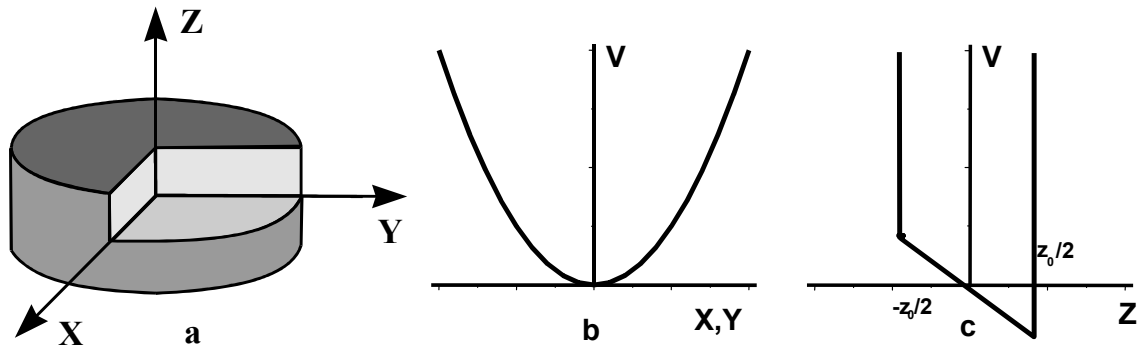


Рис. 1. Вигляд та профіль потенціалу квантової точки.

В подальших обчисленнях використовується простий параболічний потенціал, що розміщений в площині XY (рис. 1 б). Потенціал має вигляд:

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

де $m(E)$ – ефективна маса електрона, що залежить від значення його енергії, $\hbar\omega_0$ – характерна енергія зв'язку електрона в квантовій точці. Характерний розмір квантової точки визначається із співвідношення [3]:

$$r = \sqrt{\frac{2E_f}{m(E_f)\omega_0^2}} \quad (2)$$

де E_f – рівень Фермі.

Уздовж осі Z прикладене однорідне постійне магнітне поле, якому відповідає векторний потенціал:

$$\mathbf{A} = \left(-\frac{By}{2}; \frac{Bx}{2}; 0 \right), \quad \mathbf{B} = (0; 0; B). \quad (3)$$

Спін-орбітальна взаємодія описується наступним оператором:

$$H_{SL} = g \frac{\hbar\mu_B E(r)}{mcr} \hat{\mathbf{I}}\mathbf{s} \equiv \lambda \hat{\mathbf{I}}\mathbf{s}, \quad (4)$$

де μ_B – магнетон Бора, $E(r)$ – електричне поле, c – швидкість світла.

Як видно зі співвідношення, при русі електрона в напрямку перпендикулярному до напрямку зміни потенціалу внесок спін-орбітальної взаємодії буде відмінним від нуля. Для 2D електронів можна розкласти даний потенціал на дві частини. Перша частина буде залежати від зміни обмежуючого потенціалу вздовж осі Z [4, 9]:

$$V_{SO}^{BR} = a \frac{dV}{dz} (\sigma_x \hat{k}_y - \sigma_y \hat{k}_x) \quad (5)$$

де a – параметр спін-орбітального зв'язку, k – оператор хвильового вектора. Запишемо дане співвідношення в циліндричній системі координат:

$$V_{SO}^{BR} = \alpha \frac{dV(r, z)}{dz} \left(\Sigma_\phi k_r + \Sigma_r \left(k_r + \frac{e}{2\hbar} Br \right) \right) \quad (6)$$

де $k_\phi = -i(1/r)\partial/\partial\phi$, $k_r = -i(1/\phi)\partial/\partial r$, $V(r, z)$ – обмежуючий потенціал квантової точки, r – двовірний радіус.

Матриці Паулі – $\Sigma_r, \Sigma_\phi, \sigma_z$ в циліндричних координатах мають вигляд:

$$\Sigma_\rho = \begin{pmatrix} 0 & e^{i\phi} \\ e^{-i\phi} & 0 \end{pmatrix}, \Sigma_\phi = \begin{pmatrix} 0 & ie^{i\phi} \\ -ie^{-i\phi} & 0 \end{pmatrix},$$

$$\sigma_z \equiv \Sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (7)$$

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m(E)} \left[\frac{\partial}{r\partial r} r \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} \right] - \frac{i}{2} m\omega_c(E, B) \frac{\partial}{\partial \phi} + \frac{1}{8} m(E)\omega_c^2(E, B)r^2$$

$$+ V_c(r) + \frac{1}{2} \sigma_z \mu_B g(E)B + V_{SO}^R(r, \phi) + V_{SO}^{BR}(r, \phi), \quad (9)$$

де $\mu_B = e\hbar/2m_0$ – магнетон Бора, e – заряд електрона, m_0 – маса вільного електрона.

Ефективна маса електрона подається формулою [3]:

$$\frac{1}{m(E)} = \frac{1}{m(0)} \frac{E_g(E_g + \Delta)}{3E_g + 2\Delta} \left[\frac{2}{E + E_g} + \frac{1}{E + E_g + \Delta} \right], \quad (10)$$

(E – енергія електрона в зоні провідності, $m(0)$ – ефективна маса електрона на дні зони провідності, E_g та Δ – ширина забороненої зони та величина спин-орбітального розщеплення валентної зони, відповідно),

$$\omega_c(E, B) = \frac{eB}{m(E)} \quad (11)$$

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

$$+ \frac{1}{8} m(E)\omega_c^2(E, B)r^2 + \frac{1}{2} m(E)\omega_0^2 r^2 + \frac{1}{2} \sigma_z \mu_B gB - \sigma_z \alpha m(E)\omega_0 \frac{i\partial}{\partial \phi}. \quad (14)$$

Стационарне рівняння Шрьодінгера з [3,5]. Його рівні енергії та хвильові функції гамільтоніаном H_1 має аналітичний розв'язок мають вигляд:

$$E_{n,l,\sigma}^1 = \hbar\Omega_\sigma(E_{n,l,\sigma}, B)(2n + |l| + 1) + l \frac{\hbar\omega_c(E_{n,l,\sigma}, B)}{2} + \sigma \left[\frac{\mu_B}{2} g(E_{n,l,\sigma})B + l\alpha m(E_{n,l,\sigma})\omega_0^2 \right], \quad (15)$$

$$\psi_{n,l,\sigma}^1(r, \phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(i\phi) R_{n,l,\sigma}^1(r), \quad (16)$$

де

$$R_{n,l,\sigma}^1(r) = \sqrt{\frac{2}{l_B^2} \left[\frac{n!}{(n+|l|)!} \right]^{1/2}} \exp\left(-\frac{r^2}{2l_B^2}\right) \cdot \left(\frac{r^2}{l_B^2}\right)^{|l|/2} \cdot L_n^{|l|}\left(\frac{r^2}{l_B^2}\right), \quad (17)$$

n – головне квантове число, l – квантове число, що відповідає за проекцію орбітального моменту електрона на вісь z та $\sigma = \pm 1$ – квантове число,

При розгляді КТ видно, що обмежуючий потенціал вздовж радіусу КТ має також приводити до виникнення спин – орбітальної взаємодії. Даний внесок відомий як потенціал Рашби [3, 8]. В полярній системі координат оператор Рашби набуває такого вигляду:

$$V_{so}^R(r, \phi) = \bar{\sigma}_z \alpha \frac{dV_c(r)}{dr} \left(k_\phi + \frac{e}{2\hbar} Br \right). \quad (8)$$

Рівняння Шрьодінгера:

Розглянемо параболічну квантову точку з обмежуючим потенціалом (1). Магнітне поле прикладено вздовж осі z КТ. Тоді гамільтоніан електрона в циліндричних координатах (r, ϕ) набуває наступного вигляду:

тут $\omega_c(E, B)$ – циклотронна частота електрона.

$$g(E) = 2 \left[1 - \frac{m_0}{m(E)} \frac{\Delta}{3(E_g + E) + 2\Delta} \right] \quad (12)$$

тут $g(E)$ – ефективний g -фактор для напівпровідників. Співвідношення для ефективної маси та g -фактора є характерними для напівпровідників.

Перепишемо гамільтониан (9) у вигляді:

$$H = H_1 + \frac{\sigma_z \alpha m(E)\omega_0^2 eB}{2\hbar} \rho^2 + V_{so}^{BR}(r, \phi), \quad (13)$$

де

що відповідає за проекцію спина електрона на вісь z . $L_n^{|l|}(x)$ – Поліном Лагерра (Laguerre),

$$l_B = \sqrt{\hbar/m\Omega_\sigma} - \text{ефективна магнітна довжина,}$$

$$\Omega_\sigma^2 = \omega_0^2 + \frac{\omega_C^2(E, B)}{4}.$$

Хвильову функцію гамільтоніана (9) шукаємо у вигляді [3]:

$$\psi(r, \varphi) = \sum_{n,l} e^{i l \varphi} R_{n,l,\sigma}^1(r) \left[A_l^n \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + B_l^n \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right]. \quad (18)$$

Стационарне рівняння Шрьодінгера перетворюється на систему рівнянь:

$$(E_{n,l,+1}^0 - E) A_l^n + \alpha \frac{em\omega_0^2}{2\hbar} B \sum_m G_l^{nm} A_l^m +$$

$$+ i\gamma \sum_m \left\{ (l+1) I_l^{nm} + P_l^{nm} + \frac{eB}{2\hbar} J_l^{nm} \right\} B_{l-1}^m = 0,$$

$$(E_{n,l,-1}^0 - E) B_l^n - \alpha \frac{em\omega_0^2}{2\hbar} B \sum_m G_l^{nm} B_l^m -$$

$$- i\beta \sum_m \left\{ (l-1) K_l^{nm} + D_l^{nm} + \frac{e}{2\hbar} B L_l^{nm} \right\} A_{l-1}^m = 0 \quad (19)$$

Тут введені позначення:

$$G_l^{nm} = \int_0^\infty r^3 R_{n,l}^0(r) R_{m,l}^0(r) dr, \quad (20)$$

$$I_l^{nm} = K_{l+1}^{mn} = \int_0^\infty R_{n,l}^0(r) R_{m,l+1}^0(r) dr, \quad (21)$$

$$J_l^{nm} = L_{l+1}^{mn} = \int_0^\infty r^2 R_{n,l}^0(r) R_{m,l+1}^0(r) dr, \quad (22)$$

$$P_l^{nm} = \int_0^\infty r R_{n,l}^0(r) \frac{d}{dr} R_{m,l+1}^0(r) dr, \quad (23)$$

$$D_l^{nm} = \int_0^\infty r R_{n,l}^0(r) \frac{d}{dr} R_{m,l-1}^0(r) dr. \quad (24)$$

Систему рівнянь (19) можна записати в векторній формі: $\mathbf{x}_1^l \mathbf{A}_l = \mathbf{x}_2^l \mathbf{B}_{l-1}$, $\mathbf{x}_3^l \mathbf{B}_{l-1} = \mathbf{x}_4^l \mathbf{A}_l$ [5]. Енергетичний спектр електрона знаходимо чисельно з наступного співвідношення: $\det(\mathbf{x}_3^l (\mathbf{x}_2^l)^{-1} \mathbf{x}_1^l - \mathbf{x}_4^l) = 0$.

Результати розрахунків:

Для InSb квантової точки обрано наступні параметри: $m(0) = 0.014m_0$, $E_g = 0.24eV$, $\Delta = 0.81eV$ та $\alpha = 500A^2$ [3]. При розрахунках використовувались розміри квантових точок: $r=20,9nm$ та $r=18,5nm$. Вздовж осі z прикладено електричне поле.

На рис. 2(а,б,с) зображено залежність енергетичних рівнів електрона від прикладеного магнітного поля. При розрахунках розглянуто енергетичні рівні електрона з головним

квантовим числом $n=0$. Врахування СО взаємодії приводить до виникнення розщеплення енергетичних рівнів навіть при нульовому значенні прикладеного магнітного поля (Рис.2а, 2с).

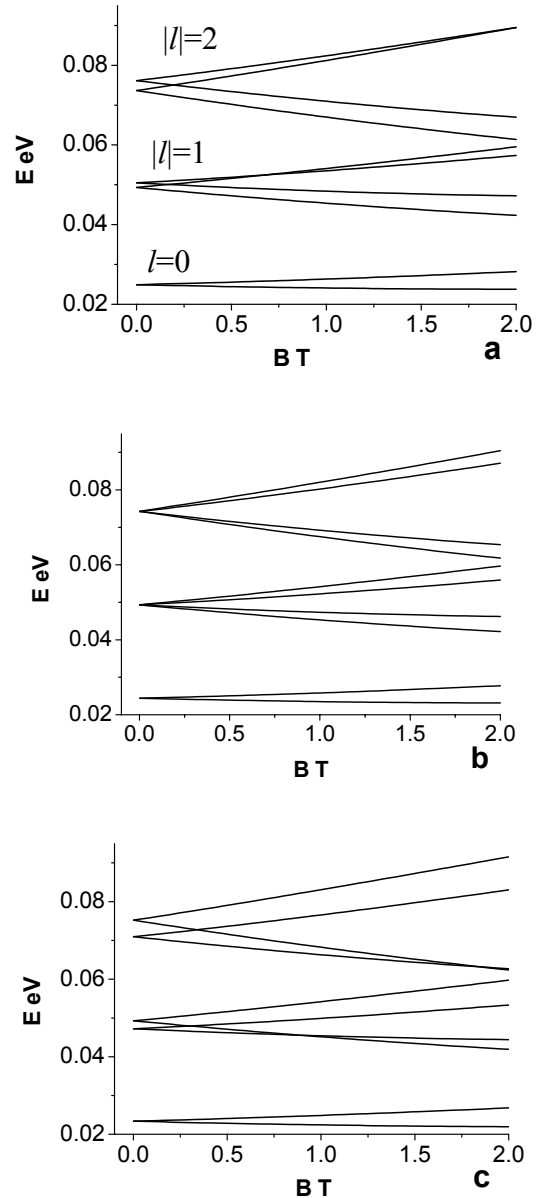


Рис. 2. Енергетичний спектр електрона в InSb квантовій точці з врахуванням складових Рашби та Бичкова-Рашби спін-орбітальної взаємодії. Розмір квантової точки $r=20,9nm$. Прикладене зовнішнє електричне поле проводить до зміни потенціалу а) $dV/dz=4meV/nm$, б) $dV/dz=10,86meV/nm$, в) $dV/dz=18meV/nm$

На рис. 2а зовнішнє електричне поле має мале значення. Складова Бичкова-Рашби СО взаємодії незначна порівнянно з складовою Рашби. Спін-орбітальна взаємодія частково знімає

виродження енергетичних рівнів електрона при нульовому значенні магнітного поля. Для $|l|=1$ та $|l|=2$ бачимо розщеплення енергетичних рівнів. Дане розщеплення приводить до перетину енергетичних рівнів електрона з однаковим орбітальним моментом і різними спіновими моментами в ненульовому магнітному полі.

На рис. 2b розглянуто випадок, коли обидві складові СО взаємодії мають однаковий вплив. Як видно з рисунку, дані складові спін-орбітальної взаємодії компенсують одна одну.

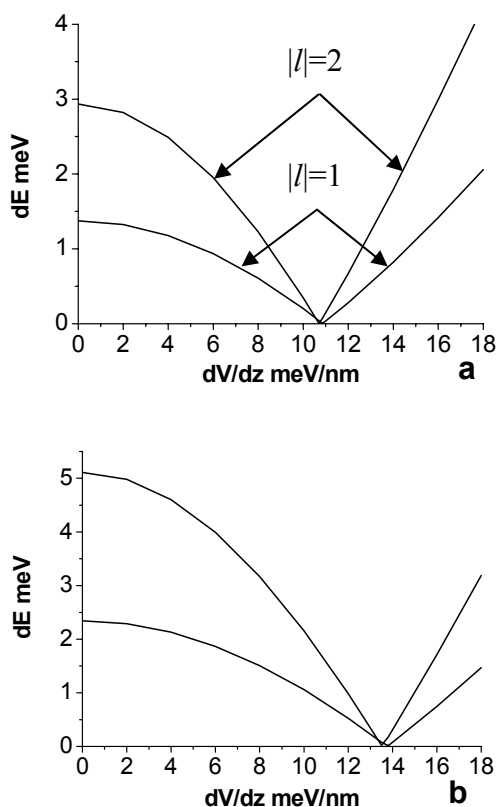


Рис. 3. Розщеплення рівнів енергії електрона, що знаходиться в InSb квантовій точці, при нульовому значенні магнітного поля, а) $r=20,9\text{nm}$, б) $r=18,5\text{nm}$.

При великому значенні електричного поля (рис. 2c) складова Бичкова-Рашби СО взаємодії домінує. Тут також також має місце розщеплення енергетичних рівнів.

Список використаних джерел

1. Hanson R. Spins in few-electron quantum dots / R. Hanson, L. P. Kouwenhoven, J. R. Petta, S. Tarucha, L. M. K. Vandersypen // *Rev. Mod. Phys Journal*. – 2007. – **79**. – P. 1217-1268.

В роботі [5] продемонстровано, що перетин електронних енергетичних рівнів в квантовій точці приводить до стрибкоподібної зміни намагніченості квантової точки, при низьких значеннях температури. З рисунку 2 видно, що керуючи величиною прикладеного електричного поля можна керувати положенням перетину енергетичних рівнів електрона, що в свою чергу приведе до зміни магнітних властивостей квантової точки.

В даній роботі представлено теоретичне дослідження впливу спін-орбітальної взаємодії на спектр електронів в InSb квантових точках. При розрахунках використовувався одноелектронний гамільтоніан. Для параболического обмежуючого потенціалу та прикладеного вздовж осі симетрії електричного та магнітного полів отримані спектри електронів в InSb квантових точках. Врахування спін-орбітальної взаємодії приводить до виникнення часткового розщеплення енергетичних рівнів електрона при нульовому значенні магнітного поля. Складова Рашби спін-орбітальної взаємодії зростає із зменшенням величини квантової точки. Складова Бичкова-Рашби пропорційна величині електричного поля прикладеного вздовж осі симетрії квантової точки. Продемонстрована конкуренція двох складових спін-орбітальної взаємодії. Зокрема, як видно з рис. 2b при розмірі КТ $r=20,9\text{nm}$ та зміні потенціалу вздовж z $dV/dz=10,86\text{meV/nm}$ складові Рашби та Бичкова-Рашби скомпенсували одна одну. При зменшенні розміру квантової точки електричне поле для компенсації двох складових спін-орбітальної взаємодії має збільшитись. Це продемонстровано на рис. 3b.

Спінове розщеплення в нульовому магнітному полі і перетин енергетичних рівнів (з однаковими за модулем проекціями орбітального моменту електрона) з зміною зовнішнім магнітним полем явні фізичні явища, які виникають за рахунок впливу спін-орбітальної взаємодії. За допомогою зовнішнього електричного поля можна керувати величиною спін-орбітальної взаємодії.

References

1. HANSON R., KOUWENHOVEN L. P., PETTA J. R., TARUCHA S., VANDERSYPEN L. M. K. (2007) Spins in few-electron quantum dots. *Rev. Mod. Phys Journal*. 79. p. 1217-1268.

2. Mosshammer K. Semiclassical spin-spin dynamics and feedback control in transport through a quantum dot / K. Mosshammer, T. Brandes // *Phys. Rev. B.* – 2014. – **90**, – P. 134305-134325.
3. Voskoboynikov O. Spin-orbit splitting in semiconductor quantum dots with a parabolic confinement potential / O. Voskoboynikov, C. P. Lee, O. Tretyak. // *Phys. Rev. B.* – 2001. – **63**. – P. 165306-165311.
4. Pietilainen P. Energy levels and magneto-optical transitions in parabolic quantum dots with spin-orbit coupling / P. Pietilainen, T. Chakraborty // *Phys. Rev. B.* – 2006. – **73**. – P. 155315-155330.
5. Voskoboynikov O. Magnetic properties of parabolic quantum dots in the presence of the spin-orbit interaction / O. Voskoboynikov, O. Bauga, C. P. Lee, O. Tretyak // *Journal of Applied Physics* – 2003. – **94**. – P. 5891-5895
6. Nishi Y. Intermediate low spin states in a few-electron quantum dot in the $\nu \geq 1$ regime / Y. Nishi, P. A. Maksym, D.G. Austing, T. Hatano, L. P. Kouwenhoven, H. Aoki, and S. Tarucha // *Phys. Rev. B.* – 2006 – **74**. – P. 033306-033309.
7. Reimann S. M. Electronic structure of quantum dots / S. M. Reimann, M. Manninen // *Rev. Mod. Phys. Journal.* – 2002.– **74**. – P. 1283-1342.
8. Magaril L. I. Ballistic transport and spin-orbit interaction of two-dimensional electrons on cylindrical surface / L. I. Magarill, D. A. Romanov, and A. V. Chaplik // *Zh. Eks. Teor. Fiz.* – 1998. – **86**. – P. 771-779.
9. Bychkov Yu. A. Properties of a 2D electron-gas with lifted spectrum degeneracy / Yu. A. Bychkov, E. I. Rashba // *JETP Lett.* – 1984, – **39**. – P. 78-81.
2. MOSSHAMMER K., BRANDES T. (2014) Semiclassical spin-spin dynamics and feedback control in transport through a quantum dot. *Phys. Rev. B.* 90. p. 134305-134325.
3. VOSKOBOYNIKOV O., LEE C. P., TRETYAK O. (2001) Spin-orbit splitting in semiconductor quantum dots with a parabolic confinement potential *Phys. Rev. B.* 63. p. 165306-165311.
4. PIETILAINEN P., CHAKRABORTY T. (2006) Energy levels and magneto-optical transitions in parabolic quantum dots with spin-orbit coupling. *Phys. Rev. B.* 73. p. 155315-155330.
5. VOSKOBOYNIKOV O., BAUGA O., LEE C. P., TRETYAK O. (2003) Magnetic properties of parabolic quantum dots in the presence of the spin-orbit interaction. *Journal of Applied Physics.* 94. p. 5891-5895.
6. NISHI Y., MAKSYM P. A., AUSTING D. G., HATANO T., KOUWENHOVEN L. P., AOKI H., AND TARUCHA S. (2006) Intermediate low spin states in a few-electron quantum dot in the $\nu \geq 1$ regime. *Phys. Rev. B.* 74. p. 033306-033309.
7. REIMANN S. M., MANNINEN M. (2002) Electronic structure of quantum dots. *Rev. Mod. Phys. Journal.* 74. p. 1283-1342.
8. MAGARILL L. I., ROMANOV D. A., AND CHAPLIK A. V. (1998) Ballistic transport and spin-orbit interaction of two-dimensional electrons on cylindrical surface. *Zh. Eks. Teor. Fiz.* 86. p. 771-779.
9. BYCHKOV YU. A., RASHBA E. I. (1984) Properties of a 2D electron-gas with lifted spectrum degeneracy. *JETP Lett.* 39. p. 78-81.

Надійшла до редколегії 06.06.15