Доклады Национальной академии наук Беларуси

2014 ноябрь–декабрь Том 58 № 6

УДК 530.145; 538.915; 538.958

В. В. КУДРЯШОВ, А. В. БАРАН

СПИН-ОРБИТАЛЬНЫЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ КРУГОВЫХ КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ

(Представлено членом-корреспондентом Л. М. Томильчиком)

Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси, Минск *Поступило 29.10.2014*

Известно [1; 2], что движение электрона во внутреннем слое полупроводниковой гетероструктуры можно рассматривать как двумерное в плоскости (x, y) благодаря наличию запирающей квантовой ямы по оси z, направленной перпендикулярно плоскости (x, y). В связи с развитием нанотехнологий возрастающее значение приобретают исследования квантовых точек в гетероструктурах. Удерживающий потенциал обычно предполагается аксиально-симметричным $V_c(x, y) = V_c(\rho)$, где $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$. Существуют два типа удерживающих потенциалов, которые широко используются в этой области. Во-первых, это – прямоугольный потенциал с непроницаемыми стенками [3; 4], во-вторых – параболический потенциал [5; 6]. Однако эти модели нефизичны, так как они в принципе не допускают наличия несвязанных состояний. В [7; 8] предложен простой, но достаточно адекватный моделируемой системе потенциал конечной глубины V для двумерных круговых квантовых точек. Этот потенциал имеет вид

$$V_c(\rho) = \begin{cases} 0, & 0 < \rho < \rho_o, \\ V, & \rho_o < \rho < \infty. \end{cases} \quad (1)$$

Здесь ρ_o – радиус квантовой точки.

Исследования влияния спин-орбитальных взаимодействий Рашбы [9] и Дрессельхауса [10] на состояния электрона в плоских гетероструктурах в последние годы получили широкое распространение. Операторы взаимодействия Рашбы V_R и Дрессельхауса V_D задаются формулами

$$V_R = \alpha_R(\sigma_x p_y - \sigma_y p_x)/\hbar, \quad V_D = \alpha_D(\sigma_x p_x - \sigma_y p_y)/\hbar,$$

где σ_x и σ_y – стандартные матрицы Паули. Интенсивности этих взаимодействий зависят от используемых материалов. Вклад каждого из взаимодействий может быть измерен с применением различных экспериментальных методов [2; 11].

Полный гамильтониан рассматриваемой задачи можно записать следующим образом:

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2M_{\text{eff}}} + V_c(\rho) + V_R + V_D, \quad (2)$$

где M_{eff} – эффективная масса электрона и $V_c(\rho)$ – потенциал вида (1). В общем случае произвольных значений интенсивностей α_R и α_D, точные решения уравнения Шредингера с гамильтонианом (2) неизвестны. В частном случае взаимодействия Рашбы $(\alpha_D = 0)$ точные решения были получены в [7; 8]. Отметим также, что легко найти подобные точные решения в альтернативном частном случае $(\alpha_R = 0)$.

В то же время значительное внимание уделяется и тому частному случаю [2; 12; 13], когда спин-орбитальные взаимодействия Рашбы и Дрессельхауса имеют равную интенсивность $\alpha_R = \alpha_D$. Это может быть экспериментально достигнуто благодаря тому, что интенсивностью взаимодействия Рашбы можно управлять внешним электрическим полем, а интенсивность взаимодействия Дрессельхауса можно менять, варьируя ширину квантовой ямы по оси z [1; 2]. В данном частном случае точные решения были найдены в [14]. В настоящей работе рассмотрен случай, когда разность интенсивностей $\alpha_R - \alpha_D$ мала по сравнению с их суммой $\alpha_R + \alpha_D$. Приближенное решение уравнения Шредингера ищется с помощью теории возмущений, когда возмущение пропорционально малому параметру

$$\gamma = \frac{\alpha_R - \alpha_D}{\alpha_R + \alpha_D}.$$

В рассматриваемом случае гамильтониан можно представить в виде суммы

$$H = H_0 + H'$$

невозмущенного гамильтониана

$$H_0 = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2M_{\text{eff}}} + \left(\frac{\alpha_R + \alpha_D}{2\hbar}\right)(\sigma_x - \sigma_y)(p_x + p_y) + V_c(\rho) \tag{3}$$

и возмущения вида

$$H' = \left(\frac{\alpha_R - \alpha_D}{2\hbar}\right)(\sigma_x + \sigma_y)(p_y - p_x) = \gamma\left(\frac{\alpha_R + \alpha_D}{2\hbar}\right)(\sigma_x + \sigma_y)(p_y - p_x).$$

Будем решать полное уравнение Шредингера $H\Psi = E\Psi$ в два этапа. Сначала получим точное решение невозмущенного уравнения Шредингера

$$H_0\Psi_0 = E_0\Psi_0, \tag{4}$$

а потом учтем влияние добавки H' в рамках теории возмущений.

Легко убедиться в том, что в случае невозмущенного уравнения (4) с гамильтонианом (3), наряду с очевидным интегралом движения

$$\sigma = (\sigma_x - \sigma_y)/\sqrt{2}$$

имеется и нетривиальный интеграл движения

$$L = L_z + \frac{(\alpha_R + \alpha_D)M_{\text{eff}}}{2\hbar}(x - y)(\sigma_x - \sigma_y),$$

где L_z – оператор углового момента. Будем искать такие решения уравнения (4), которые являются собственными функциями операторов σ и L. Тогда искомые решения допускают факторизацию вида

$$\Psi_0^{\pm}(x, y) = \mathbf{n}^{\pm} \exp\left[\mp i\frac{(\alpha_R + \alpha_D)M_{\text{eff}}}{\sqrt{2}\hbar^2}(x + y)\right]e^{im\phi}u(\rho), \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \tag{5}$$

где m – квантовое число углового момента; $\mathbf{n}^{\pm}$ – ортонормированные собственные векторы оператора σ:

$$\sigma\mathbf{n}^{\pm} = \pm\mathbf{n}^{\pm},\ \mathbf{n}^{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ \pm e^{-i\pi/4} \end{pmatrix}.$$

Здесь использованы полярные координаты ρ, ϕ ($x = \rho\cos\phi$, $y = \rho\sin\phi$). Полученные волновые функции удовлетворяют следующим соотношениям:

$$\sigma\Psi_0^{\pm}(x, y) = \pm\Psi_0^{\pm}(x, y), \quad L\Psi_0^{\pm}(x, y) = m\hbar\Psi_0^{\pm}(x, y).$$

Перейдя к безразмерным величинам

$$r = \frac{\rho}{\rho_o}, \quad e_0 = \frac{2M_{\text{eff}}\rho_o^2}{\hbar^2}E_0, \quad v = \frac{2M_{\text{eff}}\rho_o^2}{\hbar^2}V, \quad a_R = \frac{2M_{\text{eff}}\rho_o}{\hbar^2}\alpha_R, \quad a_D = \frac{2M_{\text{eff}}\rho_o}{\hbar^2}\alpha_D,$$

запишем радиальное уравнение

$$\frac{d^2u}{dr^2}+\frac{1}{r}\frac{du}{dr}+\left(e_0+a^2-v_c(r)-\frac{m^2}{r^2}\right)u=0, \tag{6}$$

где

$$a=(a_R+a_D)/2,$$
$$v_c(r)=\begin{cases}0, & 0<r<1,\\ v, & 1<r<\infty.\end{cases}$$

Уравнение (6) является уравнением Бесселя. Частные решения выбираются таким образом, чтобы радиальная волновая функция $u(r)$ была регулярной в начале координат $r\to 0$ и стремилась к нулю на бесконечности $r\to\infty$.

Потребуем выполнения условия непрерывности для радиальной волновой функции $u(r)$ и ее первой производной в граничной точке $r = 1$. В результате получаем явную формулу

$$u(r)=c\begin{cases}K_m\left(\sqrt{v-e_0-a^2}\right)J_m\left(\sqrt{e_0+a^2}\,r\right), & 0<r<1,\\ J_m\left(\sqrt{e_0+a^2}\right)K_m\left(\sqrt{v-e_0-a^2}\,r\right), & 1<r<\infty,\end{cases}$$

где $J_m(z)$ – функция Бесселя и $K_m(z)$ – модифицированная функция Бесселя [15]. Точное уравнение для определения невозмущенной энергии $e_0(m,v,a)$ имеет вид

$$K_m\left(\sqrt{v-e_0-a^2}\right)J'_m\left(\sqrt{e_0+a^2}\right)=J_m\left(\sqrt{e_0+a^2}\right)K'_m\left(\sqrt{v-e_0-a^2}\right).$$

Здесь введены обозначения

$$J'_m\left(\sqrt{e_0+a^2}\right)=\left.\frac{dJ_m\left(\sqrt{e_0+a^2}\,r\right)}{dr}\right|_{r=1},\quad K'_m\left(\sqrt{v-e_0-a^2}\right)=\left.\frac{dK_m\left(\sqrt{v-e_0-a^2}\,r\right)}{dr}\right|_{r=1}.$$

Значение c находится из условия нормировки $\left\langle\Psi_0^\pm\middle|\Psi_0^\pm\right\rangle=1$. Отметим, что функции $\Psi_0^\pm(x,y)$ ортогональны ($\left\langle\Psi_0^\pm\middle|\Psi_0^\mp\right\rangle=0$).

Наряду с безразмерными величинами e_0 и v рассмотрим возмущение в безразмерной форме

$$h'=\frac{2M_{\text{eff}}\rho_o^2}{\hbar^2}H'. \tag{7}$$

Так как каждый уровень энергии невозмущенной системы является двукратно вырожденным с двумя собственными функциями (5), будем учитывать вклад возмущения (7) по теории возмущений при наличии вырождения. Вследствие того, что $(\sigma_x+\sigma_y)\mathbf{n}^\pm=\mp i\sqrt{2}\,\mathbf{n}^\mp$, имеем следующие равенства:

$$\left\langle\Psi_0^\pm\middle|h'\middle|\Psi_0^\pm\right\rangle=0$$

для диагональных матричных элементов в базисе собственных векторов $\left|\Psi_0^+\right\rangle$ и $\left|\Psi_0^-\right\rangle$. Недиагональные матричные элементы имеют вид

$$\left\langle\Psi_0^+\middle|h'\middle|\Psi_0^-\right\rangle=\left\langle\Psi_0^-\middle|h'\middle|\Psi_0^+\right\rangle=-\gamma\delta(m,v,a),$$

где

$$\delta(m,v,a)=2ma\frac{\int_0^\infty J_1(2ar)u^2(r)\,dr}{\int_0^\infty u^2(r)\,r\,dr}.$$

Тогда для расщепления невозмущенных уровней энергии получаем

$$e^\pm(m,v,a,\gamma)=e_0(m,v,a)\mp\gamma\delta(m,v,a).$$

Нормированные собственные функции нулевого приближения, которые принадлежат собственным значениям $e^{\pm}$, описываются формулами

$$\Psi^{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\Psi_0^{+} \pm \Psi_0^{-}\right).$$

В дополнение к аналитическим результатам представим некоторые графические иллюстрации. Выбираем эффективную массу электрона $M_{\text{eff}} = 0{,}067 M_e$, характеризующую движение в арсениде галлия GaAs, где M_e – масса электрона в вакууме [4]. При выборе $\rho_o = 30$ нм имеют место следующие соответствия между безразмерными и размерными величинами: $a = 1 \rightarrow 18{,}9579$ мэВ нм, $e = 1 \rightarrow E = 0{,}631933$ мэВ.

На рис. 1–4 в безразмерном виде представлена зависимость невозмущенной энергии e_0 и относительной поправки δ / e_0 от суммарной интенсивности спин-орбитальных взаимодействий a при двух значениях глубины потенциальной ямы v = 50, 400. Сплошные линии соответствуют первым уровням энергии, а штриховые – вторым уровням для трех значений углового момента $(m = 0, 1, 2)$.

Очевидно, что полная поправка $\gamma\delta$ действительно мала по сравнению с невозмущенной энергией e_0, когда параметр γ достаточно мал. Отличительной особенностью использованного приближения является равенство нулю поправки при $m = 0$.

Таким образом, в рамках теории возмущений дано описание электронных состояний в полупроводниковых круговых квантовых точках в присутствии спин-орбитальных взаимодействий Рашбы и Дрессельхауза с реалистичным аксиально-симметричным удерживающим прямоугольным потенциалом конечной глубины.

Работа выполнена при поддержке Белорусского республиканского фонда фундаментальных исследований (грант № Ф13К-079).

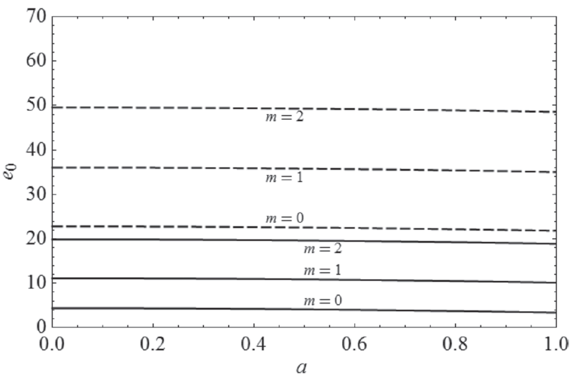

Рис. 1. Зависимость e_0 от a при v = 50

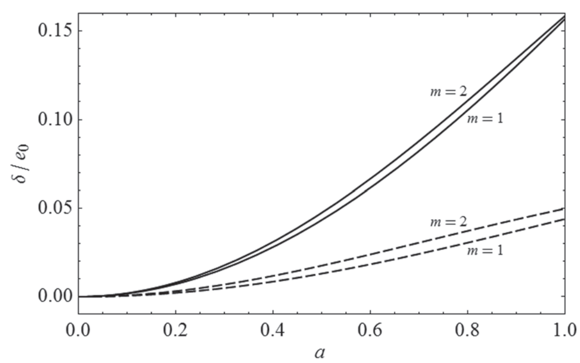

Рис. 2. Зависимость δ / e_0 от a при v = 50

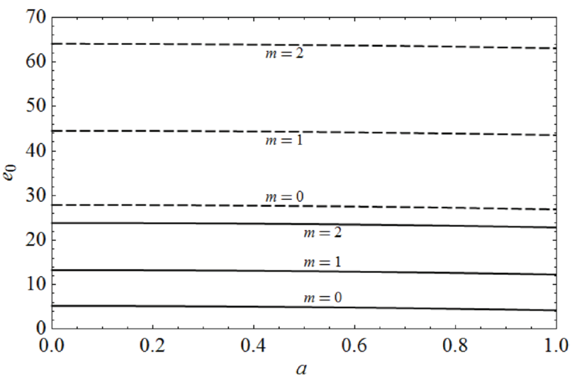

Рис. 3. Зависимость e_0 от a при v = 400

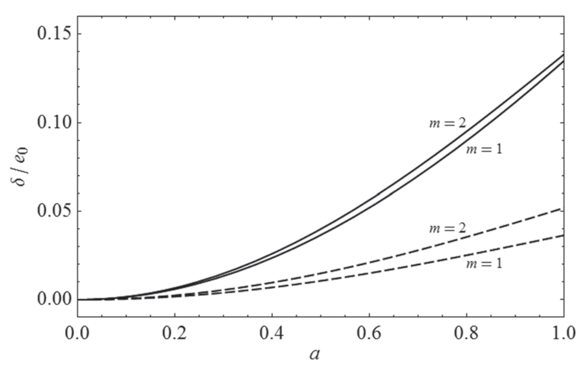

Рис. 4. Зависимость δ / e_0 от a при v = 400

Литература

1. *Valín-Rodríguez M., Puente A., Serra L.* // Eur. Phys. J. B. 2004. Vol. 39. P. 87–92.
2. *Li J., Chang K.* // Phys. Rev. B. 2010. Vol. 82. 033304.
3. *Bulgakov E. N., Sadreev A. F.* // Письма в ЖЭТФ. 2001. Т. 73. С. 573–577.
4. *Tsitsishvili E., Lozano G. S., Gogolin A. O.* // Phys. Rev. B. 2004. Vol. 70. 115316.
5. *de Sousa R., Das Sarma S.* // Phys. Rev. B. 2003. Vol. 68. 153330.
6. *Kuan W. H., Tang S. C., Xu W.* // J. Appl. Phys. 2004. Vol. 95. P. 6368–6373.
7. *Kudryashov V. V.* // Foundations and Advances in Nonlinear Science. Proceedings of the 13th International Conference and School. Minsk, 2006. P. 125–130; Nonlinear Phenomena in Complex Systems. 2009. Vol. 12. P. 199–203.
8. *Chaplik A. V., Magarill L. I.* // Phys. Rev. Lett. 2006. Vol. 96. 126402.
9. *Рашба Э. И.* // ФТТ. 1960. Т. 2. С. 1224–1238.
10. *Dresselhaus G.* // Phys. Rev. 1955. Vol. 100. P. 580–586.
11. *Meier L.* et al. // Nature Physics. 2007. Vol. 3. P. 650–654.
12. *Schliemann J., Egues J. C., Loss D.* // Phys. Rev. Lett. 2003. Vol. 90. 146801.
13. *Bernevig B. A., Orenstein J., Zhang S. C.* // Phys. Rev. Lett. 2006. Vol. 97. 236601.
14. *Кудряшов В. В., Баран А. В.* // Весці НАН Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. 2011. № 4. С. 67–70.
15. *Абрамовиц М., Стиган И.* Справочник по специальным функциям. М., 1979.

V. V. KUDRYASHOV, A. V. BARAN

kudryash@dragon.bas-net.by, a.baran@dragon.bas-net.by

SPIN-ORBIT INTERACTIONS IN SEMICONDUCTOR CIRCULAR QUANTUM DOTS

Summary

Within the framework of perturbation theory the energy levels and wave functions are found for an electron in two-dimensional semiconductor circular quantum dots in the presence of the Rashba and Dresselhaus spin-orbit interactions with realistic axially symmetric confining square potential of finite depth.