

УДК 530.145;538.915;538.958

В. В. КУДРЯШОВ, А. В. БАРАН

ВЛИЯНИЕ СПИН-ОРБИТАЛЬНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ РАШБЫ И ДРЕССЕЛЬХАУСА НА СОСТОЯНИЯ ЭЛЕКТРОНА В КРУГОВЫХ КВАНТОВЫХ КОЛЬЦАХ*Институт физики им. Б. И. Степанова НАН Беларуси**(Поступила в редакцию 20.02.2015)*

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 колец 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 работах [7, 8] предложен простой, но достаточно адекватный моделируемой системе потенциал конечной глубины V для двумерных круговых квантовых колец. Этот потенциал имеет вид

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

где ρ_i и ρ_o – внутренний и внешний радиусы кольца.

Исследования влияния спин-орбитальных взаимодействий Рашбы [9, 10] и Дрессельхауса [11] на состояния электрона в плоских гетероструктурах в последние годы получили широкое распространение. Операторы взаимодействия Рашбы V_R и Дрессельхауса V_D задаются формулами

$$V_R = \alpha_R(\sigma_x p_y - \sigma_y p_x)/\hbar, \quad V_D = \alpha_D(\sigma_x p_x - \sigma_y p_y)/\hbar, \quad (2)$$

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, 12].

Полный гамильтониан рассматриваемой задачи можно записать следующим образом:

$$H = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2M_{\text{eff}}} + V_c(\rho) + V_R + V_D, \quad (3)$$

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 (3) неизвестны. В частном случае взаимодействия Рашбы ($\alpha_D = 0$) точные решения были получены в [13]. Отметим также, что легко найти подобные точные решения в альтернативном частном случае ($\alpha_R = 0$).

В то же время значительное внимание уделяется и такому частному случаю [2, 14, 15], 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 [16]. 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

$$\gamma = (\alpha_R - \alpha_D)/(\alpha_R + \alpha_D). \quad (4)$$

Расчеты выполнены для значений параметров, связанных с арсенидом галлия GaAs.

В рассматриваемом случае гамильтониан (3) можно представить в виде суммы $H_0 + H'$ невозмущенного гамильтониана

$$H_0 = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2M_{\text{eff}}} + \left(\frac{\alpha_R + \alpha_D}{2\hbar} \right) (\sigma_x - \sigma_y)(p_x + p_y) + V_c(\rho) \quad (5)$$

и возмущения вида

$$H' = \gamma \left(\frac{\alpha_R + \alpha_D}{2\hbar} \right) (\sigma_x + \sigma_y)(p_y - p_x). \quad (6)$$

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

$$H_0\Psi_0 = E_0\Psi_0, \quad (7)$$

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

Легко убедиться в том, что в случае невозмущенного уравнения (7) с гамильтонианом (5), наряду с очевидным интегралом движения

$$\sigma = (\sigma_x - \sigma_y)/\sqrt{2} \quad (8)$$

имеется и нетривиальный интеграл движения

$$L = L_z + \frac{(\alpha_R + \alpha_D)M_{\text{eff}}}{2\hbar} (x - y)(\sigma_x - \sigma_y), \quad (9)$$

где L_z – оператор углового момента. Будем искать такие решения уравнения (7), которые являются собственными функциями операторов σ и L . Тогда искомые решения допускают факторизацию вида

$$\Psi_0^\pm(x, y) = \mathbf{n}^\pm \exp \left[\mp i \frac{(\alpha_R + \alpha_D)M_{\text{eff}}}{\sqrt{2}\hbar^2} (x + y) \right] e^{im\phi} u(\rho), \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (10)$$

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

$$\sigma \mathbf{n}^\pm = \pm \mathbf{n}^\pm, \quad \mathbf{n}^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm e^{-i\pi/4} \end{pmatrix}. \quad (11)$$

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

$$\sigma \Psi_0^\pm(x, y) = \pm \Psi_0^\pm(x, y), \quad L \Psi_0^\pm(x, y) = m\hbar \Psi_0^\pm(x, y). \quad (12)$$

Перейдя к безразмерным величинам

$$r = \frac{\rho}{\rho_o}, \quad e_0 = \frac{2M_{\text{эфф}}\rho_o^2}{\hbar^2} E_0, \quad v = \frac{2M_{\text{эфф}}\rho_o^2}{\hbar^2} V, \quad a_R = \frac{2M_{\text{эфф}}\rho_o}{\hbar^2} \alpha_R, \quad a_D = \frac{2M_{\text{эфф}}\rho_o}{\hbar^2} \alpha_D, \quad (13)$$

запишем радиальное уравнение

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{du}{dr} + \left(e_0 + a^2 - v_c(r) - \frac{m^2}{r^2} \right) u = 0, \quad (14)$$

где

$$a = (a_R + a_D)/2, \quad (15)$$

$$v_c(r) = \begin{cases} v, & 0 < r < r_i, \\ 0, & r_i < r < 1, \\ v, & 1 < r < \infty. \end{cases} \quad (16)$$

Здесь введено обозначение $r_i = \rho_i/\rho_o$ для относительной ширины кольца.

В случае прямоугольной потенциальной ямы (16) в каждой из трех областей ($0 < r < r_i$, $r_i < r < 1$, $1 < r < \infty$) уравнение (14) является уравнением Бесселя. Частные решения в первой и третьей областях выбираются таким образом, чтобы радиальная волновая функция $u(r)$ была регулярной в начале координат $r \rightarrow 0$ и стремилась к нулю на бесконечности $r \rightarrow \infty$. В результате получаем формулу

$$u(r) = \begin{cases} c_1 I_m(k_o r), & 0 < r < r_i, \\ c_{21} J_m(k_i r) + c_{22} Y_m(k_i r), & r_i < r < 1, \\ c_3 K_m(k_o r), & 1 < r < \infty, \end{cases} \quad (17)$$

где $J_m(z)$ и $Y_m(z)$ – функции Бесселя первого и второго рода, а $I_m(z)$ и $K_m(z)$ – соответственно модифицированные функции Бесселя [17]. Здесь c_1 , c_{21} , c_{22} , c_3 – произвольные коэффициенты, а кроме того, введены обозначения

$$k_o = \sqrt{v - e_0 - a^2}, \quad k_i = \sqrt{e_0 + a^2}. \quad (18)$$

Условия непрерывности для радиальной волновой функции $u(r)$ и ее первой производной в граничных точках $r = r_i$ и $r = 1$ приводят к системе алгебраических уравнений

$$T_4(m, e_0, v, a, r_i) \mathbf{X} = 0 \quad (19)$$

для четырех коэффициентов, где $\mathbf{X} = \{c_1, c_{21}, c_{22}, c_3\}$ и $T_4(m, e_0, v, a, r_i)$ – 4×4 матрица вида

$$T_4 = \begin{pmatrix} I_m(k_o r_i) & -J_m(k_i r_i) & -Y_m(k_i r_i) & 0 \\ k_o I_{m+1}(k_o r_i) & k_i J_{m+1}(k_i r_i) & k_i Y_{m+1}(k_i r_i) & 0 \\ 0 & J_m(k_i) & Y_m(k_i) & -K_m(k_o) \\ 0 & -k_i J_{m+1}(k_i) & -k_i Y_{m+1}(k_i) & k_o K_{m+1}(k_o) \end{pmatrix}. \quad (20)$$

Следовательно, точное уравнение для определения невозмущенной энергии $e_0(m, v, a, r_i)$ имеет вид

$$\det T_4(m, e_0, v, a, r_i) = 0. \quad (21)$$

Для того чтобы построить радиальную волновую функцию полностью, найдем значения искомых коэффициентов

$$\begin{pmatrix} c_{21} \\ c_{22} \\ c_3 \end{pmatrix} = -c_1 T_3^{-1}(m, e_0, v, a, r_i) \begin{pmatrix} k_o I_{m+1}(k_o r_i) \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (22)$$

где

$$T_3 = \begin{pmatrix} k_i J_{m+1}(k_i r_i) & k_i Y_{m+1}(k_i r_i) & 0 \\ J_m(k_i) & Y_m(k_i) & -K_m(k_o) \\ -k_i J_{m+1}(k_i) & -k_i Y_{m+1}(k_i) & k_o K_{m+1}(k_o) \end{pmatrix}. \quad (23)$$

Значение коэффициента c_1 находится из условия нормировки

$$\int_0^\infty u^2(r) r dr = 1/2\pi. \quad (24)$$

Отметим, что функции $\Psi_0^\pm(x, y)$ являются ортонормированными: $\langle \Psi_0^\pm | \Psi_0^\pm \rangle = 1$, $\langle \Psi_0^\pm | \Psi_0^\mp \rangle = 0$.

Из уравнения (14) видно, что зависимость e_0 от a является тривиальной:

$$e_0(m, v, a, r_i) = e_0(m, v, 0, r_i) - a^2. \quad (25)$$

Разумеется, уравнение (21) не может быть решено аналитически, но легко решается численно.

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

$$h' = \frac{2M_{\text{eff}}\rho_o^2}{\hbar^2} H'. \quad (26)$$

Так как каждый уровень энергии невозмущенной системы является двукратно вырожденным с двумя собственными функциями (10), будем учитывать вклад возмущения (26) 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:

$$\langle \Psi_0^\pm | h' | \Psi_0^\pm \rangle = 0 \quad (27)$$

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

$$\langle \Psi_0^+ | h' | \Psi_0^- \rangle = \langle \Psi_0^- | h' | \Psi_0^+ \rangle = -\gamma \delta(m, v, a, r_i), \quad (28)$$

где

$$\delta(m, v, a, r_i) = 4\pi m a \int_0^\infty J_1(2ar) u^2(r) dr. \quad (29)$$

Тогда для расщепления невозмущенных уровней энергии получаем

$$e^\pm(m, v, a, r_i, \gamma) = e_0(m, v, a, r_i) \mp \gamma \delta(m, v, a, r_i). \quad (30)$$

Нормированные собственные функции нулевого приближения, которые принадлежат собственным значениям e^\pm , описываются формулой

$$\Psi^\pm = (\Psi_0^+ \pm \Psi_0^-) / \sqrt{2}. \quad (31)$$

В дополнение к аналитическим результатам представим некоторые числовые иллюстрации. Выбираем эффективную массу электрона $M_{\text{eff}} = 0,067M_e$, характеризующую движение в арсениде

галлия GaAs, где M_e – масса электрона в вакууме. 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.

Так, например, при выбранных параметрах безразмерной величине $\nu = 400$ соответствует глубина потенциальной ямы $V = 252,772$ мэВ, близкая к значению 257 мэВ в [8].

Таблица демонстрирует существенную зависимость невозмущенной энергии e_0 от относительной ширины квантового кольца r_i при фиксированных значениях $a = 0$ и $\nu = 400$. В ней приведены только два первых уровня энергии для трех значений углового момента.

Зависимость e_0 от r_i при $a = 0$ и $\nu = 400$

r_i	$m=0$		$m=1$		$m=2$	
	$n=0$	$n=1$	$n=0$	$n=1$	$n=0$	$n=1$
0,2	11,2339	47,2363	14,8513	52,2593	24,1580	66,2640
0,5	26,8321	107,287	28,7345	109,359	34,3902	115,576
0,8	105,749	358,948	107,001	360,311	110,758	364,336

На рис. 1–3 в безразмерном виде представлена зависимость относительной поправки δ/e_0 от суммарной интенсивности спин-орбитальных взаимодействий a при трех значениях $r_i = 0,2$,

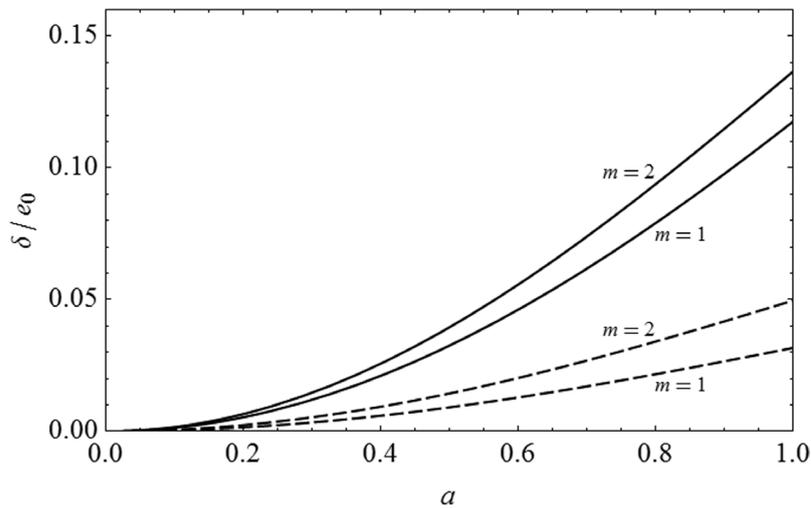


Рис. 1. Зависимость δ/e_0 от a при $r_i = 0,2$

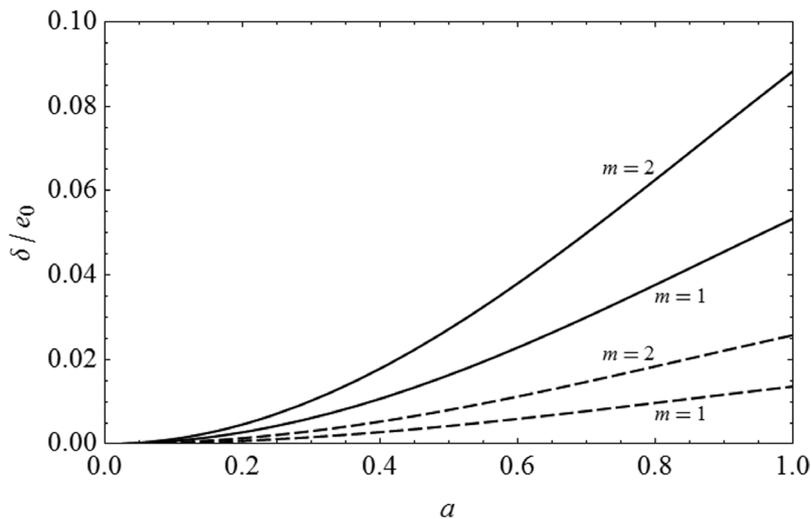


Рис. 2. Зависимость δ/e_0 от a при $r_i = 0,5$

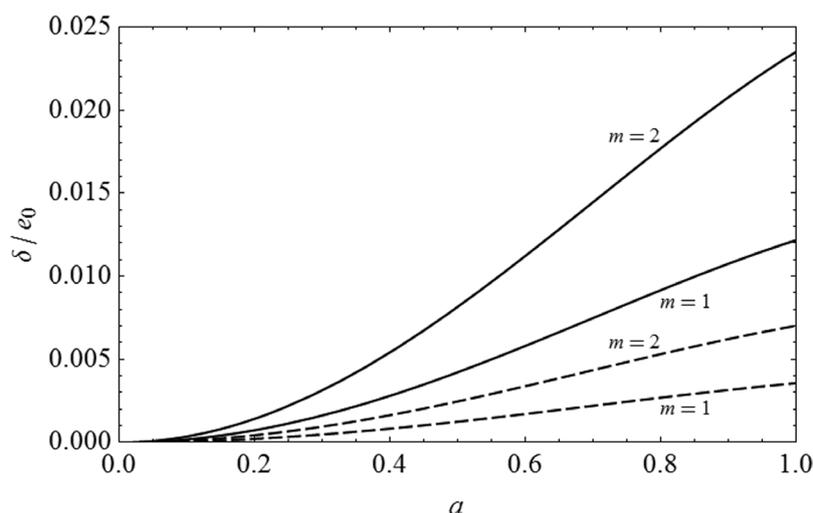


Рис. 3. Зависимость δ/e_0 от a при $r_i = 0,8$

$r_i = 0,5$ и $r_i = 0,8$. Сплошные линии соответствуют первым уровням энергии, а штриховые – вторым уровням для двух значений углового момента ($m = 1$ и $m = 2$).

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 кольцах в присутствии спин-орбитальных взаимодействий Рашбы и Дрессельхауса с реалистичным аксиально-симметричным удерживающим прямоугольным потенциалом конечной глубины.

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. Sheng J. S., Chang K. // Phys. Rev. B. 2006. Vol. 74. 235315.
4. Song J., Ulloa S. E. // Phys. Rev. B. 2001. Vol. 63. 125302.
5. Valín-Rodríguez M., Puente A., Serra L. // Eur. Phys. J. D. 2000. Vol. 12. P. 493–498.
6. Govorov A.O. et al. // Phys. Rev. B. 2002. Vol. 66. 081309.
7. Bandos T. V., Cantarero A., Garcia-Cristóbal A. // Eur. Phys. J. B. 2006. Vol. 53. P. 99–108.
8. Grochol M., Grosse F., Zimmermann R. // Phys. Rev. B. 2006. Vol. 74. 115416.
9. Рауба Э. И. // Физика твердого тела. 1960. Т. 2. С. 1224–1238.
10. Bychkov Yu. A., Rashba E. I. // J. Phys. C. 1984. Vol. 17. P. 6039–6046.
11. Dresselhaus G. // Phys. Rev. 1955. Vol. 100. P. 580–586.
12. Meier L. et al. // Nature Physics. 2007. Vol. 3. P. 650–654.
13. Kudryashov V. V. // Foundation and Advances in Nonlinear Science: Proc. of the 14th Conf.-School. Minsk. 2009. P. 95–102.
14. Schliemann J., Egues J. C., Loss D. // Phys. Rev. Lett. 2003. Vol. 90. 146801.
15. Bernevig B. A., Orenstein J., Zhang S. C. // Phys. Rev. Lett. 2006. Vol. 97. 236601.
16. Кудряшов В. В., Баран А. В. // Весці НАН Беларусі. Сер. фіз.-мат. навук. 2012. № 2. С. 92–96.
17. Абрамовиц М., Стиган И. Справочник по специальным функциям. М., 1979.

V. V. KUDRYASHOV, A. V. BARAN

INFLUENCE OF THE RASHBA AND DRESSSELHAUS SPIN-ORBIT INTERACTIONS ON THE ELECTRON STATES IN CIRCULAR QUANTUM RINGS

Summary

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