

## ACOPLAMIENTO ESPÍN ÓRBITA EN PUNTOS CUÁNTICOS BIDIMENSIONALES

E. Cudris. K. Fonseca R. R. Rey-González

Universidad Nacional de Colombia - Bogotá. Departamento de Física.

### Resumen

Se estudia el efecto del acoplamiento espín-órbita en un punto cuántico en presencia de un campo magnético homogéneo en dirección  $z$  constante. El sistema es modelado bajo la aproximación de masa efectiva y electrón independiente sometido a un potencial de confinamiento tipo oscilador armónico isotrópico en el plano  $x$ - $y$ , y tipo pozo de paredes infinitas en dirección  $z$ . Se calcula la corrección sobre los estados utilizando teoría de perturbaciones a primer y segundo orden. Se concluye que los corrimientos sobre los autovalores de más baja energía son muy pequeños, adicionalmente se observa que se levanta la degeneración sobre los niveles doblemente degenerados.

### Abstract

We study spin-orbit coupling effects in a quantum dots a constant and homogeneous magnetic field, directed along the  $z$ -axis. The system we employ the effective mass an a independent electron approximation, and assume an isotropic harmonic oscillator confinement potential in the  $x$ - $y$  plane, and an infinite well in the  $z$  direction. First and second order energy corrections due to spin-orbit coupling are calculated for the lowest states. The energy shifts turn out to be very small moreover the double degeneracy is lifted.

El conocimiento del efecto del acoplamiento espín-órbita sobre los estados de más baja energía en puntos cuánticos semiconductores permitiría establecer el tiempo de decoherencia usando la tasa de transición de estados bajo la influencia del hamiltoniano de interacción, contruyendo el operador densidad total correspondiente, luego calculando la traza sobre los grados de libertad del entorno del sistema y finalmente calculando la fidelidad y entropía lineal. De tal manera que la entropía lineal puede ser usada para definir el tiempo de decoherencia. Esto justificaría la importancia de estudiar el acoplamiento espín-órbita en este tipo de sistemas. El sistema físico que se estudia es el de un electrón confinado en el interior de un disco de GaAs de radio  $\rho$  y altura  $L$  rodeado de AlGaAs. El espesor de la capa de GaAs es del orden de  $L = 40nm$ . La energía del electrón en la banda de conducción del GaAs es mucho menor que la energía de un electrón en la banda de conducción del AlGaAs. El sistema lo modelamos como un electrón libre de interacciones, sometido a un potencial de confinamiento, a una temperatura  $T = 0K$  y en presencia de un campo magnético homogéneo y constante en la dirección de crecimiento de la capa (perpendicular al plano del punto). Las interacciones electrostáticas de los diferentes núcleos atómicos del material (GaAs) sobre el electrón se modela bajo la aproximación de masa efectiva. Existen razones de caracter experimental [1] para suponer que el potencial de confinamiento al que está sometido el electrón en el eje  $Z$ , se puede modelar como el de un pozo de paredes infinitas. El potencial efectivo al que está sometido el electrón en el plano  $X$ - $Y$  se modela como el de un potencial armónico isotrópico bidimensional [2]. El campo magnético es paralelo

a la dirección  $Z$  con una magnitud de  $B_0 = 10\text{T}$ , la masa efectiva del electrón es  $\mu = 0.7m_e$ , y la frecuencia característica del potencial efectivo de confinamiento para el electrón es  $\omega_0 = 8.2 \times 10^{12} \text{ s}^{-1}$ [3]. Así el Hamiltoniano del sistema bajo estudio con espín es

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2\mu} \left[ \vec{P}_e + q_e \vec{A} \right]^2 + \frac{\mu\omega_0^2}{2} \hat{\rho}^2 + U(z) - \frac{1}{2} g_s \mu_B \vec{\sigma} \cdot \vec{B}, \quad (1)$$

donde  $\vec{P}_e$  es el momento lineal del electrón,  $\vec{A}$  es el potencial vectorial,  $\mu$  es la masa efectiva,  $\vec{\sigma} = \sigma_x i + \sigma_y j + \sigma_z k$  donde  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  son las matrices de Pauli y  $U(z)$  es el potencial de confinamiento en dirección  $z$ ,  $\mu_B$  es el magnetón de Borh y  $g_s$  es el factor giromagnético, y  $q_e = -|e| = -e$  es la carga del electrón.

Expresando el hamiltoniano del sistema sin incluir el espín y tomando  $\vec{A} = \frac{1}{2} B_0 \rho \hat{\phi}$  con gauge  $\nabla \cdot \vec{A} = 0$ , tenemos

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{P}_r^2}{2\mu} + \frac{\hat{P}_\phi^2}{2\mu} + \frac{\hat{P}_z^2}{2\mu} + \frac{q_e B_0 \rho \hat{P}_\phi}{2\mu} + \frac{q_e^2 B_0^2 \hat{\rho}^2}{8\mu} + \frac{\mu\omega_0}{2} \hat{\rho}^2 + U(\hat{z}). \quad (2)$$

con  $\omega_c = \frac{eB_0}{\mu}$  la frecuencia del ciclotrón. Este hamiltoniano se puede reescribir en la forma

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{P}_{xy}^2}{2\mu} + \frac{\hat{P}_z^2}{2\mu} + \frac{1}{2} \omega_c \hat{L}_z + \frac{\mu}{2} \omega^2 \hat{\rho}^2 + U(\hat{z}), \quad (3)$$

con  $\omega^2 = \omega_0^2 + \frac{1}{4} \omega_c^2$ .

La energía del sistema sin incluir la interacción espín-órbita esta dada por:

$$E_{(o), N_A, N_B, n_z, m_z} = \hbar\omega_A \left( N_A + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_B \left( N_B + \frac{1}{2} \right) + \frac{\pi^2 \hbar^2 n_z^2}{2\mu L^2} \pm \frac{1}{2} g_s \mu_B B_z \quad (4)$$

donde  $E_{(o)}$  es la energía del sistema sin perturbar, y

$$\omega_{A,B} = \sqrt{\omega_0^2 + \frac{1}{4} \omega_c^2} \pm \frac{1}{2} \omega_c, \quad (5)$$

El acoplamiento espín-órbita es tratado aquí como una interacción entre el movimiento del centro de masa y los movimientos relativos, los cuales no son independientes. Esto viola las suposiciones del teorema generalizado de Kohn [3]. Suponiendo una banda de conducción tipo  $s$ , esto es construida por orbitales  $s$  solamente, esta banda no tendría momento angular interno, así para un electrón en dicha banda la interacción espín-órbita es pequeña. No obstante, el efecto de esta interacción se incrementa al aumentar el número de electrones ocupando dicha banda. Para el caso de huecos en una banda de valencia la interacción entre las sub-bandas con diferente momento angular interno (en general las bandas de valencia son tipo  $p$ ) y el espín es significativo [3]. Así el acoplamiento espín-órbita está dado por la expresión [4]

$$\hat{H}_{LS} = \xi' \left( \nabla\varphi \left( \frac{\hat{r}}{r} \right) \times \hat{\sigma} \right) \cdot \hat{P}, \quad (6)$$

con

$$\nabla\varphi(r) = \frac{\partial\varphi}{\partial x}\vec{i} + \frac{\partial\varphi}{\partial y}\vec{j} + \frac{\partial\varphi}{\partial z}\vec{k}, \quad (7)$$

y

$$\xi' = \frac{e\hbar}{4m_e^2c^2} \quad (8)$$

de tal forma que la energía potencial del electrón bajo la acción del campo magnético esta dada por

$$U(r) = \left[ \frac{1}{2}\omega_c\widehat{L}_z + \frac{\mu}{2}\omega^2\widehat{\rho}^2 \right]. \quad (9)$$

que en función de los operadores posición y momento en coordenadas cartesianas es

$$U(r) = \left[ \frac{1}{2}\omega_c(\widehat{x}\widehat{p}_y - \widehat{y}\widehat{p}_x) + \frac{\mu}{2}\omega^2(\widehat{x}^2 + \widehat{y}^2) \right]. \quad (10)$$

Pero como  $\nabla\varphi = -\frac{\nabla U}{e}$ ,  $\beta = \sqrt{\frac{\mu\omega}{\hbar}}$  y expresando el hamiltoniano de perturbación en términos de los operadores escalera  $\widehat{a}$ ,  $\widehat{a}^\dagger$ ,  $\widehat{b}$  y  $\widehat{b}^\dagger$  tenemos, renombrando  $\xi = -\frac{\xi'}{e}$  que:

$$\begin{aligned} \xi \left( \nabla U \left( \frac{\widehat{r}}{r} \right) \times \widehat{\sigma} \right) \cdot \widehat{P} = & \xi \frac{\omega_c}{4} \beta^2 \hbar^2 (\widehat{a} - \widehat{a}^\dagger)^2 \widehat{\sigma}_z + \xi \frac{\mu\omega^2 \hbar}{2i} (\widehat{b}^\dagger \widehat{a} - \widehat{a}^\dagger \widehat{b}) \widehat{\sigma}_z \\ & + \xi \frac{\omega_c}{4} \beta^2 \hbar^2 (\widehat{b} - \widehat{b}^\dagger)^2 \widehat{\sigma}_z \\ & + \xi \left[ \frac{\omega_c \beta \hbar}{2\sqrt{2}i} (\widehat{b} - \widehat{b}^\dagger) + \frac{\mu\omega^2}{\sqrt{2}\beta} (\widehat{a}^\dagger + \widehat{a}) \right] \widehat{\sigma}_y \widehat{p}_z \\ & - \xi \left[ \frac{\omega_c \beta \hbar}{2\sqrt{2}i} (\widehat{a} - \widehat{a}^\dagger) + \frac{\mu\omega^2}{\sqrt{2}\beta} (\widehat{b}^\dagger + \widehat{b}) \right] \widehat{\sigma}_x \widehat{p}_z, \quad (11) \end{aligned}$$

ahora si definimos las constantes:

$\xi \frac{\mu\omega^2 \hbar}{2i} = \frac{\varepsilon}{i}$	$\xi \frac{\omega_c \beta \hbar}{2i\sqrt{2}} = \frac{\theta}{i}$	$\xi \frac{\mu\omega^2}{\sqrt{2}\beta} = \Delta$	$\frac{\theta}{\sqrt{2}} = N$	$\xi \frac{\omega_c \beta^2 \hbar^2}{2} = M$	$\frac{\Delta}{\sqrt{2}} = R$
--	--	--	-------------------------------	--	-------------------------------

Tabla 1: redefiniendo constantes

Así el hamiltoniano (7) se puede reescribir en termino de los operadores escalera para cuantos circularmente polarizados como

$$\begin{aligned} \widehat{H}_{LS} = & M \left( \widehat{A}\widehat{B} + \widehat{A}^\dagger\widehat{B}^\dagger - \widehat{A}^\dagger\widehat{A} - \widehat{B}^\dagger\widehat{B} - 1 \right) \widehat{\sigma}_z + \varepsilon \left( \widehat{B}^\dagger\widehat{B} - \widehat{A}^\dagger\widehat{A} \right) \widehat{\sigma}_z \quad (12) \\ & - N \left( \widehat{B} - \widehat{A} + \widehat{B}^\dagger - \widehat{A}^\dagger \right) \widehat{p}_z \widehat{\sigma}_y - iN \left( \widehat{A} + \widehat{B} - \widehat{A}^\dagger - \widehat{B}^\dagger \right) \widehat{p}_z \widehat{\sigma}_x \\ & + R \left( \widehat{A}^\dagger + \widehat{B}^\dagger + \widehat{A} + \widehat{B} \right) \widehat{p}_z \widehat{\sigma}_y + iR \left( -\widehat{B}^\dagger + \widehat{A}^\dagger + \widehat{B} - \widehat{A} \right) \widehat{p}_z \widehat{\sigma}_x \end{aligned}$$

Aplicando teoría de perturbaciones a primer orden tenemos que el elemento de matriz es

$$\begin{aligned}
 \langle N'_A, N'_B, n'_z, m'_z | \hat{H}_{LS} | N_A, N_B, n_z, m_z \rangle = & \quad (13) \\
 & M m_z \sqrt{N_A} \sqrt{N_B} \times \\
 & \delta_{N'_A, N_A-1} \delta_{N'_B, N_B-1} \delta_{m'_z, m_z} \delta_{n'_z, n_z} \times \\
 & + M m_z \sqrt{N_A+1} \sqrt{N_B+1} \times \\
 & \delta_{N'_A, N_A+1} \delta_{N'_B, N_B+1} \delta_{m'_z, m_z} \delta_{n'_z, n_z} \\
 & - M N_A m_z \delta_{N'_A, N_A} \delta_{N'_B, N_B} \delta_{m'_z, m_z} \delta_{n'_z, n_z} \\
 & - M N_B m_z \delta_{N'_A, N_A} \delta_{N'_B, N_B} \delta_{m'_z, m_z} \delta_{n'_z, n_z} \\
 & - M m_z \delta_{N'_A, N_A} \delta_{N'_B, N_B} \delta_{m'_z, m_z} \delta_{n'_z, n_z} \\
 & + \varepsilon m_z N_B \delta_{N'_A, N_A} \delta_{N'_B, N_B} \delta_{m'_z, m_z} \delta_{n'_z, n_z} \\
 & - \varepsilon m_z N_A \delta_{N'_A, N_A} \delta_{N'_B, N_B} \delta_{m'_z, m_z} \delta_{n'_z, n_z}.
 \end{aligned}$$

Evaluando este elemento para los estados de más baja energía obtenemos

$$E_p = E_{(o), N_A, N_B, n_z, m_z} + \langle N'_A, N'_B, n'_z, m'_z | \hat{H}_{LS} | N_A, N_B, n_z, m_z \rangle, \quad (14)$$

$$E_{0,0,1,\pm 1} = E_{(o),0,0,1,\pm 1} \pm M, \quad (15)$$

Evaluando el orden de magnitud a primer y segundo orden:

Energía	$\mu = 0.7m_e$	$m_{lh} = 0.082m_e$	$m_{hh} = 0.5m_e$
$E_{1,(0,0,1,-1)} = M$	$-3.14 \times 10^{-12} eV$	$-3.45 \times 10^{-10} eV$	$-8.43 \times 10^{-12} eV$
$E_{2,(0,0,1,-1)}$	$3.35 \times 10^{-18} eV$	$5.33 \times 10^{-18} eV$	$2.52 \times 10^{-21} eV$

Tabla 2: valor de la corrección sobre los autovalores

Por los resultados obtenidos se concluye que el orden de magnitud de la corrección generada por el acoplamiento espín-órbita sobre los autovalores del sistema, es despreciable. La degeneración se levanta sobre los niveles doblemente degenerados y la separación entre la energía del estado base y el primer estado excitado aumenta.

## Referencias

- [1] ASHOORI, R., Nature **379** 413-419 (1996).
- [2] BANYAI, L., and KOCH, S., Semiconductor Quantum Dots. Ed Word Scientific (1993).
- [3] JACAK, L., KRASNÝJ, J., WÓJS, A., Physica B. **229** 279-293 (1997).
- [4] PAREEK, T., and BRUNO, P., Journal of Physics Indian. **58** 293-311 (2002).