SZEGEDI TUDOMÁNYEGYETEM
TERMÉSZETTUDOMÁNYI ÉS INFORMATIKAI KAR
ELMÉLETI FIZIKAI TANSZÉK
FIZIKA DOKTORI ISKOLA

ANTWERPENI EGYETEM
TERMÉSZETTUDOMÁNYI KAR
ELMÉLETI SZILÁRDTESTFIZIKAI KUTATÓCSOPORT
FIZIKA DOKTORI ISKOLA

Kétdimenziós mezoszkopikus struktúrák kvantumos transzportjelenségei

PhD értekezés tézisei

Szerző:

Szaszkó-Bogár Viktor

Társ-témavezető:

Dr. Földi Péter

egyetemi docens

Társ-témavezető:

Prof. Dr. François M. Peeters

egyetemi tanár

SZEGED

2015

1. Bevezetés

A mezoszkopikus rendszereket kiemelkedő tudományos érdeklődés övezi, mert ezen objektumok a makro- és a mikrovilág határán helyezkednek el. A makrovilág jelenségeinek leírására elegendő és megfelelő eszköztárat nyújt a klasszikus fizika, amíg a másik esetben (jelenlegi tudásunk szerint) a kvantumfizika törvényeit kell alkalmaznunk. Az átlagos szabad úthossz (vagy momentum relaxációs hossz) alacsony hőmérsékleteken ($\sim$ mK) tipikusan a $100 - 1000\,\mathrm{nm}$ intervallumba esik. Az ún. fázis koherencia hossz adja meg azt a távolságot, ami alatt az elektron, amit egy hullámfüggvény reprezentál, képes interferálni önmagával annak ellenére, hogy ütközéseket szenved a mintában. Általában a fázis koherencia hossz nagyságrendje megegyezik az átlagos szabad úthosszával. Amikor a vizsgált rendszer térbeli kiterjedése összemérhető a töltéshordozók átlagos szabad úthosszával, a kvantumos interferencia effektusok nem hanyagolhatóak el.

Félvezető heterostruktúrákban olyan elektromos tér épül fel, mely merőleges a különböző félvezető anyagok határfelületére és az elektronokat az érintkezési réteg közelében lévő térrészbe kényszeríti. Ezek a térbeli mozgásukban korlátozott töltéshordozók alkotják az ún. kétdimenziós elektrongázt (2-DEG). A vezetési sáv elektronjai kiemelkedően magas koherencia hosszal rendelkezhetnek ilyen mintákban. GaAs/AlGaAs rendszerek esetén az előbb említett effektusokat (és az elektronok magas mozgékonyságát) az a térbeli szeparáció magyarázza, mely az AlGaAs rétegben lévő donor atomok és a GaAs rétegben lévő elektronok között lép fel. Ennek az a következménye, hogy a kvantummechanikai interferencia jelenségek döntő szerepet játszanak ezen heterostruktúrák vezetési tulajdonságainak kialakulásában.

A mezoszkopikus rendszerek tanulmányozása mögött az alapvető aspektusokon kívül az a fontos motiváció is meghúzódik, hogy lehetséges alkalmazásokat tárjunk fel, amelyek főként a spinfüggő tulajdonságok kísérletileg megvalósítható kontrollját célozzák. A spin felhasadás jelensége kétdimenziós elektrongázban két különböző effektus eredményeként jön létre. Kutatásunk középpontjában az ún. Rashba-féle spin-pálya kölcsönhatás [1] áll. A Dresselhaus típusú

spin-pálya csatolással [2] ellentétben, a Rashba spin-pálya csatolás nem hozható kapcsolatba a tömbi anyagi tulajdonságokkal. Kísérletileg megmutatták [3], hogy az ilyen típusú kölcsönhatások csak olyan félvezető heterostruktúrákban vannak jelen, amelyekben az inverziós szimmetria a növesztés irányában sérül. A Rashba spin-pálya kölcsönhatás erőssége kísérletileg kontrollálható, ami annak a következménye, hogy az elektronokat kétdimenziós mozgásra kényszerítő elektromos potenciál külső kapufeszültségekkel hangolható. Számos kísérlet igazolta, hogy az α Rashba-paraméter az előbbiek szerint modulálható [4, 5], ami a vizsgált nanoeszközön átfolyó elektronok spinfüggő tulajdonságainak a megváltozásához vezet.

A spintronika a spin szabadsági fok aktív manipulációjának vizsgálatával foglalkozik, főleg az információfeldolgozás céljait szem előtt tartva. A terület számos spin transzformációs effektushoz és lehetséges alkalmazáshoz kapcsolódik, amelyek közül az egyik első eredmény a Datta-Das spin térvezérlésű tranzisztor (SFET) [6] volt. Fontos megjegyezni, hogy a spintranszport abban különbözik a töltéstranszporttól, hogy a spin egy nem megmaradó mennyiség a fentebb említett spin-pálya kölcsönhatás és a hiperfinom csatolás miatt. A spintronika területéről származó tanulmányok jelentős része a spintranszport jelenségek mellett kvantumos információ feldolgozási eljárásokkal, spin qubitekkel foglalkozik [7]. Szélesebb kontextusban, a spintronika alapvető célja a részecskék spinje és az őket tartalmazó szilárdtest rendszer közötti kölcsönhatási mechanizmusok megértése. Ezt az ismeretanyagot a spinnel összefüggő elektronikai eszközök készítésére akarjuk majd felhasználni [8].

2. Motiváció és célkitűzések

Napjainkban a mezoszkopikus objektumok fizikája és a különböző spinrendszerek kvantumelmélete számos kísérleti és elméleti kutatás középpontjában áll. A fő oka ennek két tényezőből tevődik össze: *a)* a kvantumos interferencia jelenségek megjelenése szilárdtest rendszerekben; *b)* az ezekhez kötődő lehetséges alkalmazások. Nem szabad elfeledkeznünk arról, hogy a folyamatosan fejlődő kísérleti technológia lehetővé teszi olyan anyagi minták előállítását, melyek érdekesek mindkét szempontból. Például molekulanyaláb epitaxia (MBE) eljárással GaAs-AlAs periodikus struktúrát lehet készíteni [9], emellett InAlGa/InGaAs heterostruktúrák [10] vagy HgTe/HgCdTe kvantumgödrök [11] is fontosak a mi nézőpontunkból.

A vizsgálódásaink fő célja nanoméretű szuperrácsok vezetési tulajdonságainak a meghatározása volt Rashba-féle spin-pálya kölcsönhatás jelenlétében. Az elektrontranszport erősen függ a kísérletileg kontrollálható spin-pálya csatolás erősségétől. Elképzelésünk szerint, ezen laterális rendszerek építőelemei egyenes kvantumdrótok, melyek összekapcsolódva zárt pályát alkothatnak az elektronok számára. Fontos motiváció volt számunkra, hogy vizsgáljuk a spin-polarizált (tiszta) állapotok létrejöttének lehetőségét egy adott nanoméretű eszköz kimenetén. A spin-polarizáció – azaz meghatározott irányú spinnel rendelkező elektronok előállítása – nyilvánvalóan alapvető fontosságú a spintronikai alkalmazások szempontjából. Többszörös kvantumos interferencia a zárt hurokban ehhez az effektushoz vezethet.

Sok tudományos kutatás célja feltárni új elméleteket és módszereket, amelyek spintronikai alkalmazások (például, kvantumos logikai kapuk) alapjául szolgálhatnak. Véleményem szerint a XXI. század legfontosabb és legizgalmasabb kérdéseinek egyike, hogy milyen úton fogjuk megoldani a kvantumos információ feldolgozást, azaz mikor válik a kvantumszámítógép kézzel fogható realitássá. Jelenünkben a nanotudományok gyors ütemű fejlődése új anyagok (nanoanyagok) és az előállításukhoz szükséges úttörő gyártási technológiák felfedezéséhez vezetett. Emellett az elméleti modellek és módszerek is jelentősen fejlődtek az évek során, ami egy ígéretes lehetőséget jelent a kvantummechanika elvein alapuló adatfeldolgozás megvalósítására.

3. Vizsgált témakörök

1. Kutatásunk során olyan nanorendszereket vizsgáltunk, amelyekben az elektronok, melyek részt vesznek a spin- és töltéstranszportban, egymódusú keskeny kvantumvezetékekben mozoghatnak. Ezek a csatornák az építőelemei a kétdimenziós végtelen szuperrácsoknak és a véges nanostruktúráknak. Ezen rendszerek transzport tulajdonságait *a)* a magas mozgékonyságú elektronok interferenciája; *b)* a Rashba spin-pálya csatolás erőssége és *c)* a szuperrács geometriája határozza meg. Fő célunk a végtelen szuperrács spinfüggő sávszerkezetének a kiszámítása, ami az $E_{n,m}(\mathbf{k})$ diszperziós reláció meghatározását jelenti, ahol az n és az m sávindexek a mesterséges kristály térbeli periodicitásával kapcsolatosak.

2. A Landauer-Büttiker formalizmus [12] szerint, egy kvantumdrót G vezetőképessége arányos a vékony hullámvezetőben mozgó elektronok T transzmissziós valószínűségével:

$$G(E) = \frac{2e^2}{h} M T(E), \tag{1}$$

ahol M jelöli a vezetési módusok számát. (Munkánk során feltételezzük, hogy $M = 1$.) Ezt felhasználva vizsgáltuk nagy, de véges méretű hálózatok vezetési tulajdonságait. Az elektronokra vonatkozó transzmissziós valószínűségek a spin orientáción keresztül függenek a spin-pálya kölcsönhatás erősségétől. A vezetőképesség emiatt spinfüggő viselkedést mutat, ami különféle lehetséges spintronikai alkalmazásokat vetít elő. Tanulmányoztuk véges struktúrák vezetési tulajdonságait magas hőmérsékleteken is.

3. Egyszerű poligon geometriákban tanulmányoztuk az időfüggő transzportjelenségeket. Modellünkben a vékony kvantumvezetékekben mozgó elektronok dinamikáját egy oszcilláló Rashba típusú spin-pálya kölcsönhatás manipulálja, azaz a rendszert leíró Hamilton-operátor a spin-pálya csatolási tagon keresztül függ az időtől.

4. Alkalmazott módszerek

Az értekezésben tárgyalt modelljeink olyan szuperrácsok és hurok geometriák, melyek nanoméretű eszközöket reprezentálnak, emellett egy bemeneti és egy kimeneti terminállal rendelkeznek. A rendszereinket felépítő kicsiny keresztmetszetű kvantumvezetékekben a töltéshordozók Rashba-féle spin-pálya csatolás jelenlétében mozognak.

A vizsgált laterális, kétdimenziós struktúrákban ($x - y$ sík) az elektronok viselkedését leíró Hamilton-operátor, mely tartalmazza a Rashba spin-pálya csatolási tagot, a következő kifejezéssel adható meg:

$$H = \hbar\Omega \left[\left(-i\frac{\partial}{\partial s} + \frac{\omega}{2\Omega}\mathbf{n}(\sigma \times \mathbf{e}_z) \right)^2 - \frac{\omega^2}{4\Omega^2} \right], \tag{2}$$

ahol az $\mathbf{n}$ egységvektor a választott pozitív irányba mutat a drót mentén és definiáltuk a $\hbar\Omega = \hbar^2/2m^*a^2$ mennyiséget, az ún. karakterisztikus kinetikus energiát (a jelöli az egyik irányban a rácsállandót). A spin-pálya kölcsönhatás erősségét $\omega/\Omega = \alpha/a\Omega$ adja meg, ahol az α Rashba-paraméter függvénye a z-irányú alkalmazott elektromos térnek [13]. A dimenziótlan hosszváltozót s jelöli, melyet a egységekben mérünk.

Abból a célból, hogy megkeressük az egész geometriára vonatkozó sajátállapotokat, megfelelő határfeltételeket [14] kell alkalmaznunk: a megoldásoknak folytonosnak kell lenniük az illesztési pontokban, emellett meg kell követelnünk, hogy a spin-áramsűrűségek algebrai összege nulla legyen ezekben a pontokban.

Végtelen, periodikus struktúrát tekintve, a Bloch-hullám megoldások a következő alakot öltik:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r})e^{i\mathbf{kr}}, \tag{3}$$

a $\varphi(\mathbf{r})$ rácsperiodikus spinorokkal és a $\mathbf{k} = (k_1, k_2)$ kétdimenziós hullámszám vektorokkal. Ez egy további, speciális illesztési feltételt jelent, ami a Bloch-tételből [15] következik. A következmény egy olyan energiaspektrum, mely sajátos struktúrával rendelkezik, például nem találunk megoldásokat bizonyos energia tartományokban. A sávszerkezet meghatározása azzal

ekvivalens feladat, hogy meg kell találnunk azt az $\{E(\mathbf{k}), k_1, k_2\}$ hármast, mely kapcsolódik a probléma egy Bloch-hullám sajátspinorjához.

Véges struktúra (mérete: $N \times N$, ahol az N pozitív egész adja meg az elágazások számát) esetében a Landauer-formula (1) szolgáltatja a vezetőképességet. A $G(E)$ mennyiség a transzmissziós valószínűségeken keresztül függ a spin-pálya csatolás erősségétől.

Véges hőmérsékleteken a transzportfolyamat szempontjából kitüntetett elektronok nem modellezhetőek egyetlen monoenergiás állapottal. Továbbá nem elhanyagolható egy nagy, de még mezoszkopikus rendszerben, hogy a transzport nem lesz ballisztikus és a töltéshordozók hullámfüggvényeinek kvantummechanikai koherenciája nem fog fennállni a rendszer egészét tekintve. Azért, hogy tekintetbe tudjuk venni ezt a jelenséget, bevezetünk véletlen, független pontszerű szórócentrumokat a hálózaton. A feltételezett interferencia effektus érzékeny a spin-pálya kölcsönhatásra, ezért a szórócentrumok is spinfüggést hordoznak.

A kvantumrendszerek gyakran kölcsönhatnak időfüggő külső terekkel (például egy külső lézer impulzussal pumpált rendszer). Esetünkben az időfüggés a Rashba-féle spin-pálya csatolás erősségén keresztül jelentkezik a modellben. Ez azt jelenti, hogy a már ismertetett Hamilton-operátor (2) módosul: a konstans ω-át kicseréljük egy $\omega(t) = \omega_0 + \omega_1 \cos(\nu t)$, függvényre, ahol a ν az oszcilláció körfrekvenciája. Ezek után a probléma ekvivalens az időfüggő Schrödinger-egyenlet megoldásával, melyben időben periodikus Hamilton-operátor szerepel. Ezt felhasználva alkalmazzuk a Floquet elméletet [16] a kvázi-sajátenergiák és a kvázi-sajátállapotok meghatározására. Az állapotok időfejlesztése során megjelennek az $n \cdot \nu$ felharmonikusok.

5. Új tudományos eredmények

1. Meghatároztuk egy végtelen szuperrács spinfüggő sávszerkezetét. Ehhez felhasználtuk annak a Hamilton-operátornak a sajátenergiáit és sajátspinorjait, amely az elektronok mozgását írja le egy egydimenziós kvantumdrótban Rashba típusú spin-pálya csatolás jelenlétében. Ezek az egymódusú kvantumos csatornák a végtelen szuperrács építőelemei. Eredményeink szerint a tiltott és megengedett sávok pozícióját és szélességét a mesterséges kristály geometriai paraméterei és a spin-pálya kölcsönhatás erőssége határozza meg [III.].

2. Meghatároztuk a vezetési tulajdonságait egy olyan hálózatnak, mely egy véges részét képezi az előző pontban tárgyalt végtelen szuperrácsnak. Megmutattuk, hogy a sávszerkezet az alacsony hőmérsékletű vezetőképesség energia függését már relatíve kicsiny hálózatokban (amelyek 5×5 számú elágazást vagy többet tartalmaznak) is meghatározza. Számításaink szerint a véges hálózatok vezetőképessége lényegében zéró azon energiáknál, amelyek a tiltott sávokhoz tartoznak a végtelen szuperrácsok esetén [III.].

3. A véges blokkok vezetőképességét magas hőmérsékleteken is meghatároztuk. Azt találtuk, hogy ha a vezetési módusok közül csak a transzverzális alapállapot gerjesztett, akkor a (ezzel a feltétellel tekintett) magas hőmérsékletű vezetés független a Fermi-energia értékétől. Továbbá a berendezés vezetőképessége kontrollálható a kísérletileg szabályozható spin-pálya csatolás erősségével ezen a hőmérséklet tartományon is. Vizsgálataink szerint ezen eredmények fizikai háttere az, hogy a sávszerkezet függ a spin-pálya kölcsönhatás erősségétől: nincsenek tiltott sávok, amikor a spin-pálya kölcsönhatás erőssége zérus, de annak növelésével a tiltott sávok megjelennek és egyre szélesebbé válnak [II.].

4. Vizsgáltuk azt a kérdést, hogy a dekoherenciát okozó effektusok hogyan befolyásolják a véges hálózatok vezetőképességét. Véletlenszerű, független Dirac-δ szórócentrumokat vezettünk be, amelyek a csomópontokban helyezkednek el. Annak ellenére, hogy a vezetőképesség finom részletei, mint a Fermi-energia és a spin-pálya kölcsönhatás erősségének függvénye elkenődnek, a sávokhoz kötődő kép érvényes marad, még akkor is, amikor a vezetés erősen lecsökken a

szórási effektusok miatt. Ez azt jelenti, hogy modellünk szerint a fázist elhangoló effektusok jelenlétében is lehetséges kontrollálni a hálózat vezetését a spin-pálya kölcsönhatás erősségének a modulálásán keresztül [II.].

5. Megmutattuk, hogy elektronsűrűség és spin-polarizációs hullámok jelennek meg és lépnek ki olyan két terminállal rendelkező nanoeszközökből, amelyekben a spin-pálya kölcsönhatás időben oszcillál. Ezek az egyszerű hurok geometriák forrásai lehetnek spin-polarizált hullámcsomagoknak – teljesen polarizálatlan bemenet esetén is. Ez a dinamikai spin-polarizációs effektus számításaink szerint a kísérletileg elérhető paramétertartományban jelenik meg, és megfigyelhető marad mérsékelt intenzitású szórási folyamatok jelenlétében is. Modellünk egy újszerű spin-polarizált elektronforrás lehetőségét kínálja, ami megvalósítható tisztán félvezető anyagok segítségével, külső mágneses terek nélkül [I.].

6. Publikációk

A tézispontokban felsorolt eredményeimet az alábbi publikációk tartalmazzák:

[I.] **V. Szaszkó-Bogár**, P. Földi, F. M. Peeters,

Oscillating spin-orbit interaction as a source of spin-polarized wavepackets in two-terminal nanoscale devices,

J. Phys.: Cond. Matt. **26**, 135302 (2014).

[II.] P. Földi, **V. Szaszkó-Bogár**, F. M. Peeters,

High-temperature conductance of a two-dimensional superlattice controlled by spin-orbit interaction,

Phys. Rev. B **83**, 115313 (2011).

[III.] P. Földi, **V. Szaszkó-Bogár**, F. M. Peeters,

Spin-orbit interaction controlled properties of two-dimensional superlattices,

Phys. Rev. B **82**, 115302 (2010).

Az értekezéshez nem kapcsolódó közlemény:

[IV.] **V. Szaszkó-Bogár**, F. M. Peeters, P. Földi,

Oscillating spin-orbit interaction in two-dimensional superlattices: sharp transmission resonances and time-dependent spin-polarized currents,

arXiv:1502.05798 [cond-mat.mes-hall] (2015).

Hivatkozások

[1] E. I. Rashba, Sov. Phys. Solid State **2**, 1109 (1960).

[2] G. Dresselhaus, Phys. Rev. **100**, 580 (1955).

[3] E. A. de Andrada e Silva, G. C. L. Rocca, and F. Bassani, Phys. Rev. B **55**, 16293 (1997).

[4] J. Nitta, T. Akazaki, H. Takayanagi, and T. Enoki, Phys. Rev. Lett. **78**, 1335 (1997).

[5] D. Grundler, Phys. Rev. Lett. **84**, 6074 (2000).

[6] S. Datta and B. Das, Appl. Phys. Lett. **56**, 665 (1990).

[7] D. D. Awschalom, D. Loss, and N. Samarth, *Semiconductor Spintronics and Quantum Computation* (Springer, Berlin, 2002).

[8] I. Žutić, J. Fabian, and S. D. Sarma, Rev. Mod. Phys. **76**, 323 (2004).

[9] L. Esaki and L. L. Chang, Phys. Rev. Lett. **33**, 495 (1974).

[10] T. Koga, J. Nitta, T. Akazaki, and H. Takayanagi, Phys. Rev. Lett. **89**, 046801 (2002).

[11] M. König *et al.*, Phys. Rev. Lett. **96**, 076804 (2006).

[12] S. Datta, *Electronic transport in mesoscopic systems* (Cambridge University Press, Cambridge, 1995).

[13] F. E. Meijer, A. F. Morpurgo, and T. M. Klapwijk, Phys. Rev. B **66**, 033107 (2002).

[14] S. Griffith, Trans. Faraday Soc. **49**, 345 (1953).

[15] C. Kittel, *Quantum Theory of Solids*, 2 ed. (Wiley, New York, 1987).

[16] G. Floquet, Ann. École Norm. Sup. **12**, 46 (1883).

Coauthor's declaration

I hereby certify that I am familiar with the thesis of the applicant **Mr. Viktor Szaszkó-Bogár** entitled Quantum Transport Phenomena Of Two-Dimensional Mesoscopic Structures. Regarding our jointly obtained results that form part of this PhD dissertation, I declare the followings: The applicant's contribution was prominent in obtaining the following results:

[I.] **V. Szaszkó-Bogár**, P. Földi, F. M. Peeters,

Oscillating spin-orbit interaction as a source of spin-polarized wavepackets in two-terminal nanoscale devices,

J. Phys.: Cond. Matt. **26**, 135302 (2014).

[II.] P. Földi, **V. Szaszkó-Bogár**, F. M. Peeters,

High-temperature conductance of a two-dimensional superlattice controlled by spin-orbit interaction,

Phys. Rev. B **83**, 115313 (2011).

[III.] P. Földi, **V. Szaszkó-Bogár**, F. M. Peeters,

Spin-orbit interaction controlled properties of two-dimensional superlattices,

Phys. Rev. B **82**, 115302 (2010),

I did not and will not use these results in getting an academic research degree.

Dr. Péter Földi

Prof. Dr. François M. Peeters