

円および楕円量子ドットの励起スペクトルと交換相互作用

Y.戸倉陽子^{*}、佐々木聡^{*}、D.G.オースティング^{*}、S.タルチャ^{*}

NTT物性科学基礎研究所 〒243-0198 神奈川県厚木市森の里若宮3-1
東京大学大学院理学系研究科物理学専攻 〒113-0033 東京都文京区本郷7-3-1
243-0198 神奈川県厚木市森の里若宮3-1ERATOメゾスコピック相関プロジェクト内

要旨

磁場中の円形および楕円量子ドットにおける相互作用電子の量子状態を調べた。楕円ドットを異なる強さの2つの直交放物型閉じ込めポテンシャルでモデル化し、単電子状態の解析形を利用した。ゼロ磁場近傍の円形ドットに存在するフントの第一法則に一致する4電子系の高スピン状態は、ドットの形状が円対称性から変形するにつれて不安定になる。3電子系と4電子系の励起スペクトルを実験と比較した。その結果有限磁場における単電子準位交差近傍で実現される高スピン状態について議論する。©2001 Elsevier Science B.V. All rights reserved.

PACS: 73.23.Hk; 73.63.Kv

キーワード量子ドット; クーロンブロックード; 相互作用

1. はじめに

半導体の量子ドットにおける離散的なエネルギー準位の秩序化は、軌道やスピンに関連する様々な効果のため、現在大きな関心を集めている[1]。2次元放物線閉じ込めポテンシャルを持つ円形量子ドットにおける4個の電子の充填は、フントの第一法則に従うことが以前に確認されている。しかし、円対称性が崩

れると、1電子準位の縮退が解除されるため、この法則は成り立たなくなる[2]。

^{*} 筆者。Tel: +00-81-46-240-3482; fax: +00-81-46-240-4727.

電子メールアドレス: tokura@will.brl.ntt.co.jp (Y. Tokura)

。面内磁場が存在する楕円ドットのゼーマンシフトを調べることで、スピン三重項状態が存在しないことが確認された。

最近、矩形メサ内の楕円ドットの付加エネルギースペクトルと、磁場印加によるクーロン振動（CO）ピークのシフトが調べられた[3]。

楕円型量子ドットは、スピン（電荷）密度の波状状態が実現可能な対称性の小さい系[4-7]の観点から注目されている[8-10]。しかし、磁場中での状態の詳細な性質に関する

報告は少ない[11,12]²。本論文では、ゼロ磁場における多電子エネルギースペクトルの違いに対する軌道エネルギーとポテンシャルエネルギーの寄与について議論する。

² 参考文献[12]の波動関数の導出は、我々のものと似ている。[12]の波動関数の導出は我々のものと似ているが、明示的な形式を提供していない。

と非ゼロ磁場を円形と楕円形の量子ドットの間にかける。第2節では、この系のモデルと多電子系の量子状態の計算方法について述べる。フントの第一法則の破れ

三重項状態および他の高スピン状態については第3節で論じ、結論は以下の通りである。セクション4.付録Aは、磁場印加中の楕円量子ドットの波動関数の詳細を示している。

2. 電子状態

我々が考えるシステムは、ゲート電圧の関数として調整可能な電子数 (N) を持つ、垂直な円形または楕円形の量子ドットである。 $(\sqrt{\$})$ である。[3].磁場(B)は z 方向に沿って電流の流れと平行に印加される。ンテーションを用いた。 x - y 平面におけるドットの閉じ込めポテンシャルを、強さの異なる2つの直交パラボリック閉じ込めポテンシャル ω_x と ω_y でモデル化する。一粒子ハミルトニアンは従って

$$H_0 = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - e\mathbf{A})^2 + \frac{m}{2} (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2) \\ = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m} + \frac{m}{2} (\Omega_x^2 x^2 + \Omega_y^2 y^2) \\ + \frac{\omega_z}{2} (y p_x - x p_y), \quad (1)$$

ここで、対称ゲージ $\mathbf{A} =$ とする。

$B/2(-y, x, 0)$ 、 $\omega_z = eB/m$ 、 $\Omega_x = \omega_x/2$ 、 $\Omega_y = \omega_y/2$ 。ゼー

どこ

$$E_{n,m} = \frac{(\omega_x^2 + \omega_y^2)}{8(\Omega_x^2 + \Omega_y^2)} (2n+1) = \frac{3}{2} \Omega^2 \\ \text{で、} \Omega^2 = (\Omega_x^2 - \Omega_y^2)^2 + 2\omega_z^2 (\Omega_x^2 + \Omega_y^2), \quad S_2 = \text{である} \\ 3\omega_z^2 + \Omega_x^2 \Omega_y^2 = 3\Omega^2 \text{である。}$$

MadhavとChakrabortyが別の方法で導き出した。法[11]を用いた。単一粒子レベルの磁場依存性の例を図4aに示す。

シュレーディンガーの方程式は、 $H T_{n,m} = E_{n,m} T_{n,m}$ である。 $\Omega_x = \frac{1}{2}(\omega_x + \omega_y)$ 、 $\Omega_y = \frac{1}{2}(\omega_x - \omega_y)$ 。パラメーターの $\varepsilon = \omega_z/\omega_x$ は2次元ドットの偏心率を表す。

y 方向に広がる波動関数と x 方向に広がる波動関数の間にある。簡単のため、 $1 \leq \varepsilon < 2$ において、最低3つの単一粒子状態を $a: (nm) = (00)$ 、 $\beta: (01)$ 、 $c: (10)$ とする。

$\hbar\omega_z = \hbar J\omega_z = 4\text{meV}$ とする。

COピークのエネルギーの単位としても使用する。

を次のように計算する。波動関数 $T_{n,m}$ は、別の同様のユニタリー・トランスによって得られる。

の形成については、付録A [12,13]に記述され

ている。さて、第二量子化表現ではハミルトニアンのカウロン相互作用部分は次のようになる。

$$H = \frac{1}{2} \sum_{n,m} (n,m | U | n,m, n,m) \\ \times a_{n,m}^\dagger b_{n,m}^\dagger a_{n,m} b_{n,m} \quad (4)$$

直接的相互作用項と交換的相互作用項は以下の通りである。それぞれ \hat{E}_{DC} と \hat{E}_{ζ} と表記する。

(\cdot) は状態 (nm) を表す。例えば $(01,00|U|00,01) = \hat{E}_{DC}$ 、 $(10,00|U|10,00) = \hat{E}_{\zeta}$ 。マンエネルギーは無視される。 Ω_x, Ω_y は2つの独立した調和振動子の強さを与える。

式(1)の最後のクロス項を選択する。最後の項は、ユニタリー変換を使って消すことができる。

$\exp[(a^\dagger b + ab^\dagger) + \dots]$ のようなユニタリー演算子である。

$\exp[(a^\dagger b + ab^\dagger) + \dots]$ のようなユニタリー演算子である。

$$t(a^\dagger b^\dagger + ab) + t(a^\dagger a^\dagger - aa) + t(b^\dagger b^\dagger - bb)] \quad (2)$$

ここで、生成・消滅演算子 $a, a^\dagger, b, b^\dagger$ は2つの調和振動子のものである。パラメータ t_k を決定した後、最終的な形は次のようになる。

$$H_0 = \frac{1}{2} (a^\dagger a + 1) + \frac{1}{2} (b^\dagger b + 1), \quad (2)$$

グリーン行列の要素は、 $E9Ee2/4nol\Omega /(\hbar\omega_0)$

(~ 1.705 for $B=0T$) で適切に因数分解され、 $l\Omega$

$2\pi\hbar/(m\omega_0)[1+\omega_0^2/(\omega_0+\omega_0)^2]$ となる、

であり、 $\omega_0 \sim 12.5\omega_0$ はGaAsの誘電率である。系の有効質量 $m=0.67m^a$ である。 $\epsilon=1$ の場合、 z

方向の有限井戸幅 w を無視すると (2次元の極限)、行列要素は単純な定数であり、 $ED=C$ 、 $ED=0T$ である。

$C, E^a = 'C, ED = ED^5C, = 'a a i a \quad \wedge = 'a i P C,$

$a \quad a i P \quad a \quad P i P \quad ^32 \quad P i Y \quad \overline{C} = \int 2'E9$ を持つ $^2C, EP, Y^3$ 行列要素の ϵ による変化を図1a

にプロットする。 $B \neq 0T$ の場合、 $(00, 00|U|10, 01)$ のような他の行列要素は次のようになる。と比較するために

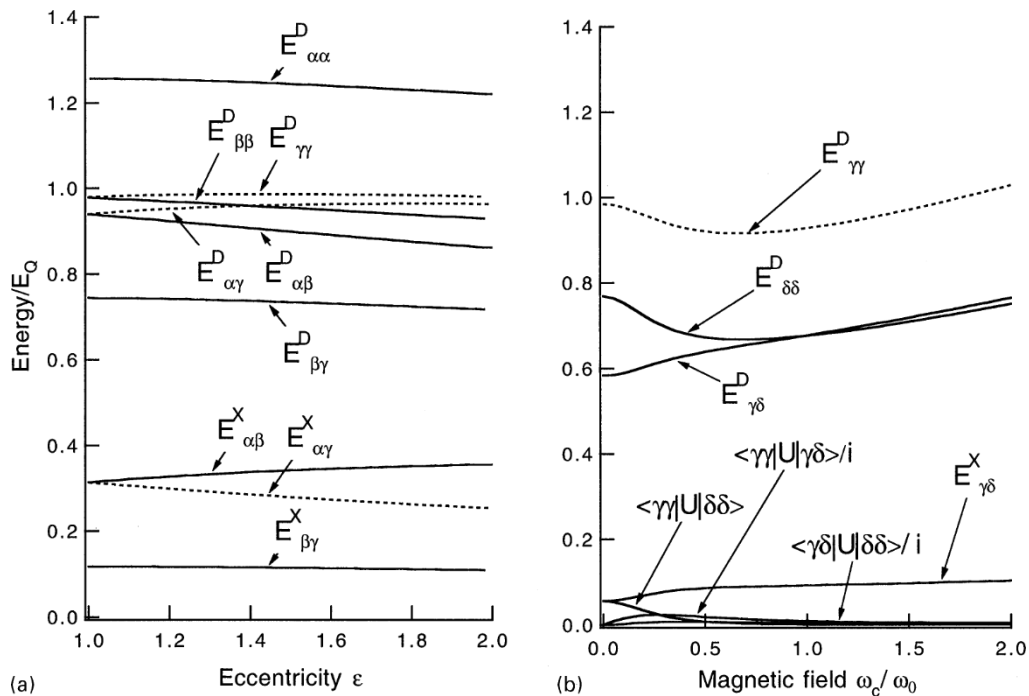


図1. (a) $B=0T$ における2次元量子ドットのクーロン行列要素の ε 依存性。(b) $\varepsilon=1.2$ におけるクーロン行列要素の磁場依存性。状態 ϕ は $(0 \ 1D715)=(03)$ に対応する。ここでは $w=0nm$ (2次元極限) の場合のみを示す。

実験結果も考慮に入れている。

に沿った波動関数の有限の広がり。

に關係するのは、 z 方向に沿った最下層だけである。

w=12 nmの井戸。このため、クーロン行列の要素を評価するための数値積分が必要となり、その値は約30%小さくなる。

とは対照的に、式(2)を用いてスピン S 部分行列を計算した。[12]とは対照的に、基底状態(GS)と励起状態(ES)のエネルギーを計算するために、式(2)を基礎としてスピン S 部分行列を使用します。

3. 結果

まず、 $B=0T$ における4電子のエネルギー
スペクトルを、2つの電子がa状態で凍結して

(S)の状態は $ED + E^{\wedge}$ と ${}^1(ED + ED$
 である。 $\frac{P+Y}{P+Y} \quad P+Y \quad 2P+P \quad Y+Y$
 $J(1+E_1)2+(E^{\wedge})2$ 、ここで $\frac{E}{\Delta E} \quad \frac{1}{1/\varepsilon} \quad \frac{E}{\varepsilon}$
 $\frac{E}{2\Delta P} + \frac{E^{\wedge}}{\Delta P} + \frac{ed}{Y+Y} + \frac{ed}{P+P}$ と $\frac{2E}{\varepsilon} \quad \frac{E}{\varepsilon}$ 我々は
 共通エネルギーオフセット $3(\varepsilon+1/\varepsilon)+$ を引く。
 $\frac{E}{\Delta E} + \frac{2E}{\Delta P} - \frac{E}{\Delta P} + \frac{D}{\Delta Y} - \frac{2EE}{\Delta Y}$ もし $\varepsilon=1$
 であれば、 E' はゼロであるため、セクション2
 の値を使用する。
 C状態のエネルギーは 1C 、S状態のエネルギーは

C (二重縮退) と $8C$ である。
 いる3準位(a, β , c)モデルで解析する。これは物理的に現実的で単純な図式である[14]。スピン三重項(T)状態のエネルギーは

T状態はフントの第一法則に一致する基底状態である。図2cに示すように、2つのS状態が $\epsilon=1$ で反交差していることは興味深い。これは、 β 状態とc状態の一重項占有が共鳴した結果である。これは

$$E_{\pi\gamma}^D - E_{\pi\gamma}^A \quad \text{一方、3つのスピン一重項}$$

ϵ を増加させると、S状態の1つが安定する。 Δ と E_1 が増加し、最終的にトリップレット-シングレット(T-S)遷移が起こるからである。数値基底を切り捨てることによる誤差は1%以下と見積もられる。基本エネルギー準位構造 $\epsilon=1$ は3レベルとあまり変わらない。

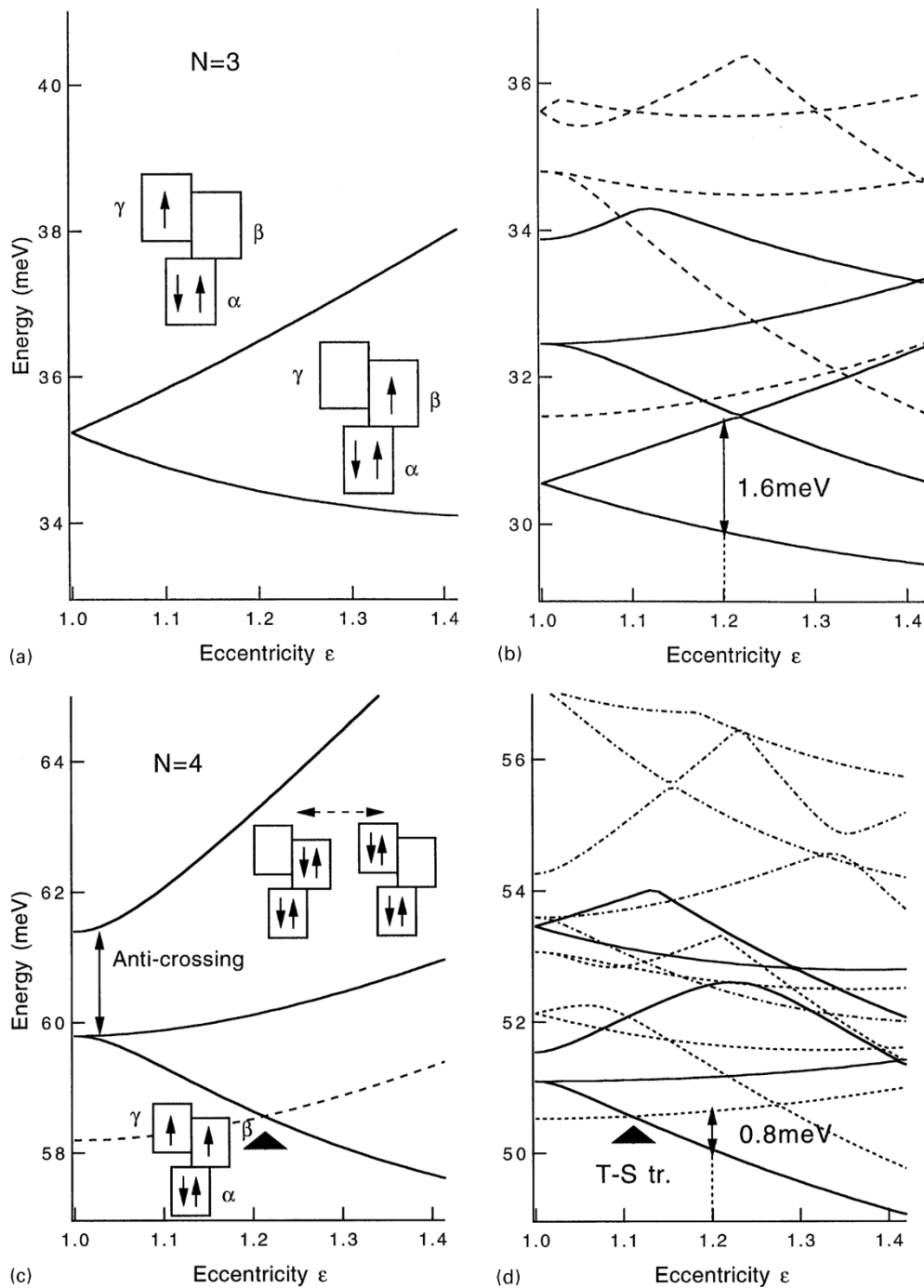


図2. $N=3$ (上(a),(b))と $N=4$ (下(c),(d))の磁場ゼロに対する楕円量子ドットのエネルギーの ϵ の関数。左のパネル ((a), (c)) : 単純な3準位近似による結果。右のパネル((b), (d)): (b)が10基底(d)が15基底の場合の結果。

状態および有限の井戸幅 $w=12$ nmが考慮されている。各スピン状態の5準位のみを示す。 $N=3(N=4)$ の場合、実線は $S=1(S=0)$ 、破線は $S=3(S=1)$ 、破線は $S=2$ 。

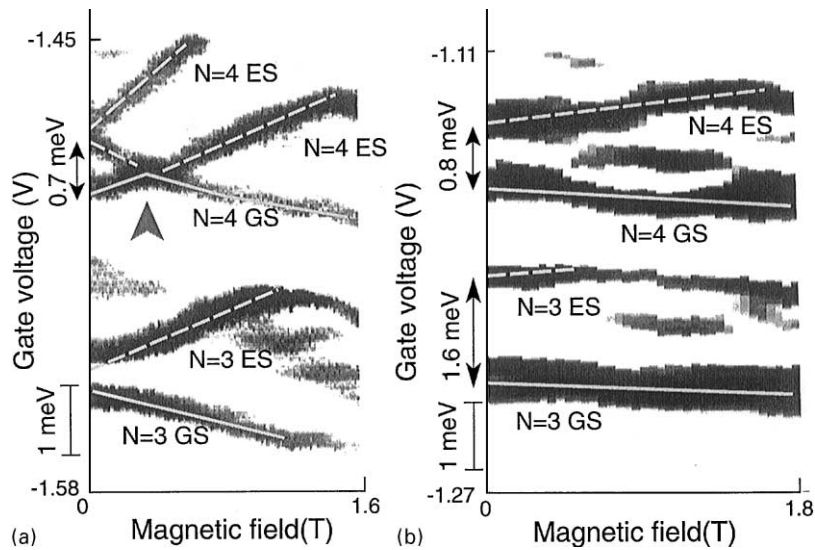


図3.左(右): 円形(楕円)ドット。実線の輝線がGSを強調し、破線の輝線がESを示す。

モデルで、T-S転移の臨界値 ϵ は約1.12であり、これは他の[3,7]の結果と一致している。

図3は、2次元円形ドットと楕円ドットの上下の接点間のバイアスの差分コンダクタンスを示している。

B - V_g 面で1.8 mV。実験の詳細は文献[3]を参照されたい。[3].円形ドット(図3a)の場合直径0.54 μm のメサの $N=4$ GSではT-S遷移が見られるが、0.55 \times 0.4 μm^2 のメサの楕円ドット(図3b)では見られない。 $N=3,4$ のゼロ磁場での励起エネルギー(それぞれ1.6meVと0.8meV)と比較すると、楕円ドット(右)の ϵ パラメータは約1.2である(図2参照)。

磁場依存性は、角運動量が量子数として良くない楕円系でも量子状態を区別するのに役立つ。化学ポテンシャル $\mu_k(N) = E_k(N) - E_i(N-1)$ を磁場の関数としてプロットする。図4bは、 $N=1\sim 4$ 、 $\epsilon=1.2$ でのネットフィールド、ここで $E_i(N)$ と $E_k(N)$ はそれぞれ N 電子のGSと i 番目の状態のエネルギーである。またそのエネルギーはGSより1.8meV小さい。この

数値結果は、実験で見られた磁場による準位の進化をうまく説明している。

高スピン状態($S=1$)は、円形ドット[15]だけでなく楕円ドット[14]においても、有限磁場での単一電子準位交差付近で実験的に観測されている。例えば、 $c:(10)$ と $\partial(0M)$ 状態は $1 \leq \varepsilon < J/2$ で $M \approx 2$ (最後の図4aに示すように、文献[3]の[3])で示されているように、図4aのようになる。図4aこのような交差点で観測される高スピン状態は、楕円ドットの場合、円ドットの場合よりも安定性が低いようである[15]。クーロンポテンシャルが同じ全スピン S と波動関数の同じ空間パリティを持つほぼ全ての状態(nm)を混合するため、同じスピン状態を持つ多電子準位がしばしば反交差するため、楕円ドットの状況は複雑です[12]。この効果により、 $S=0$ の状態は安定化し、 $S=1$ の状態は起こりにくくなる。しかし、多電子 $S=0$ 状態の反交差とその安定化を担うドミナント行列要素、例えば $(c, c|U|\partial, \partial)$ は、図1bに示すように、磁場によって無視できるほど小さくなります。外部電荷(例えばゲート電極)による遮蔽に由来する閉じ込めポテンシャルの非放射性的効果は、非放射性が予想されるため、単一粒子準位にアンチクロッシングを導入する。

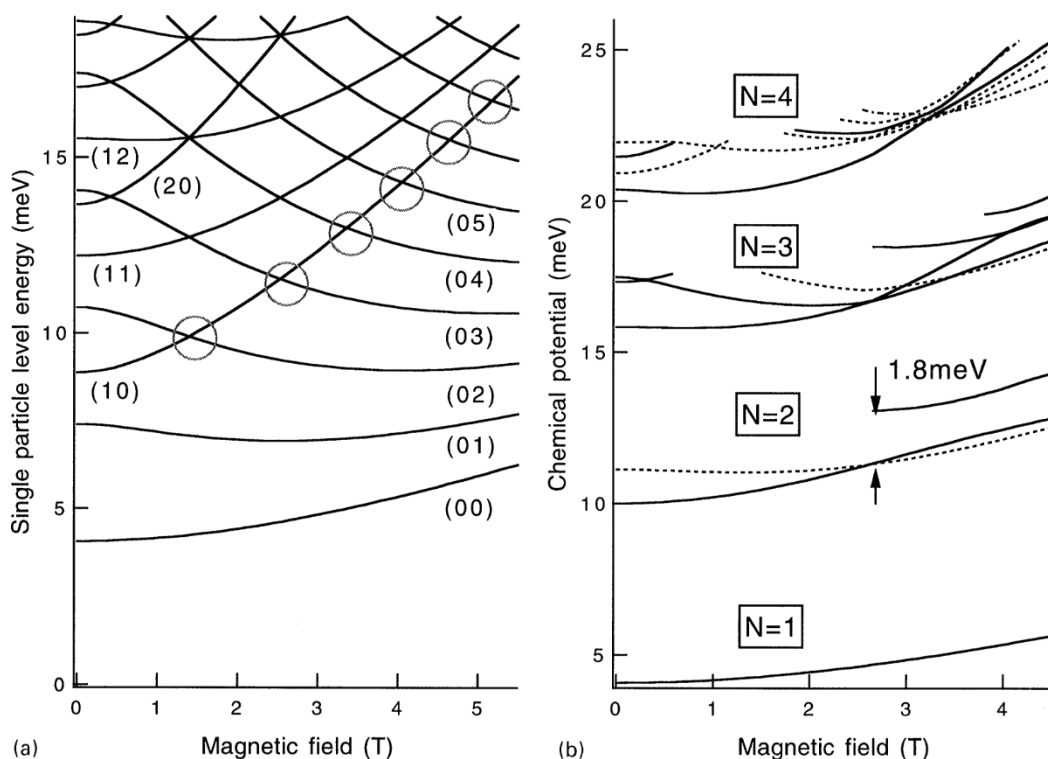


図4. (a) $\epsilon=1.2$, $\hbar\omega_0=4$ meVの場合の単一粒子準位(nm)の磁場依存性。円はCOスペクトルにおいて最後のくねりが予想される準位交差を示している。(b) $\epsilon=1.2$, $\hbar\omega_0=4$ meVの化学ポテンシャル。電子が1個、2個、3個、4個の場合の磁場。 $N=1, 3$ ($N=2, 4$)の場合、実線は $S=1/2$ ($S=0$)、破線は $S=3/2$ ($S=1$)および点線は $N=4$ の $S=2$ 。各スピンの最下位5準位でGSより1.8 meV以下の励起状態のみを示す。

楕円ドットの場合は x 方向と y 方向で異なるが、円ドットの場合は円対称性が崩れないため、ほとんど無視できる。したがって、後者の効果が、単電子準位交差近傍で高スピン状態があまり目立たない原因になっていると考えられる。

ることがわかった。

4. 結論

磁場中における楕円形量子ドット中の相互作用電子の量子状態を、強さの異なる2つの直交放物面閉じ込めポテンシャルのモデルを用いて調べた。フントの第一法則に関するゼロ磁場近傍の高スピン状態は、磁場中における電子の偏向が強くなるにつれて不安定にな

Y.戸倉ほか/ *Physica B* 298 (2001) 260,266
偏心パラメーター $\varepsilon=1.2$ での実験とよく似てい
る。
プログラム (NTDP-98) およびCREST-JSTの支
援を受けた。

謝辞

貴重な議論をしてくれた平山雄一郎氏に感謝する。本研究の一部は、NEDO共同研究プ

円形から始まるドット形状の作成
が増加する。計算された3電子系と4電子系の
励起スペクトルは、以下のように適合した。

付録A.波動関数

この付録では、磁場中の2次元楕円量子ドットの波動関数を $\omega \approx \omega$ [13,16]と仮定して明示的に示す。

この波動関数は、ガウス基底状態に対して作用する作用素を上昇させた形で、文献[16]に示されている。[16].

