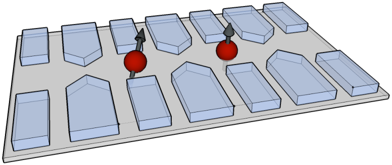
Spin-Bahn-Kopplung in Graphen

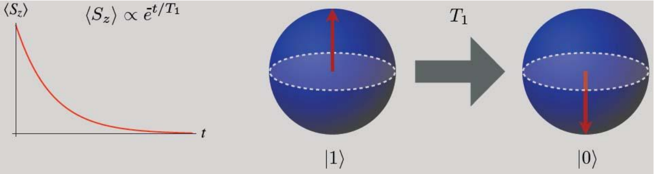
Adrian Auer

08.06.09

Motivation

- Realisierung eines Quantencomputers durch Festkörper-Qubits
- Leistungsfähigkeit hängt ab von Lebensdauer
- Spin-Bahn-Kopplung beeinflusst Qubit-Dynamik





Erweitertes Tight-Binding Modell

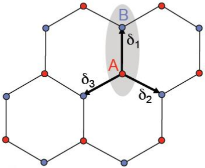
Min *et al.*, *Phys. Rev. B* **74**, 165310 (2006)

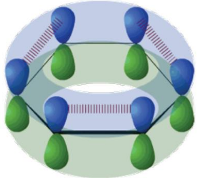
- Störungsrechnung erfordert weitere Zustände
- Berücksichtigung von s-und p-Orbitalen

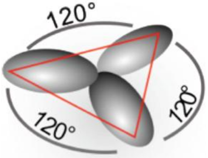
Matrixelemente:

$$H_{A,\mu;A,\mu'}(\mathbf{k}) = H_{B,\mu;B,\mu'}(\mathbf{k}) = t_\mu \delta_{\mu,\mu'}$$

$$H_{A,\mu;B,\mu'}(\mathbf{k}) = H^*_{B,\mu;A,\mu'}(\mathbf{k}) = \sum_{i=1}^{3} e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_i} t_{\mu,\mu'}(\boldsymbol{\delta}_i)$$







Hamilton-Operator

Matrixelemente am $\boldsymbol{K}(\boldsymbol{K}')$-Punkt:

Orbital	A, s	A, p_x	A, p_y	A, p_z	B, s	B, p_x	B, p_y	B, p_z
A, s	s'							
A, p_x		p						
A, p_y			p					
A, p_z				p				
B, s					s'			
B, p_x						p		
B, p_y							p	
B, p_z								p

Hamilton-Operator

Matrixelemente am $\boldsymbol{K}(\boldsymbol{K}')$-Punkt:

Orbital	A, s	A, p_x	A, p_y	A, p_z	B, s	B, p_x	B, p_y	B, p_z
A, s	s							
A, p_x		0						
A, p_y			0					
A, p_z				0				
B, s					s			
B, p_x						0		
B, p_y							0	
B, p_z								0

Hamilton-Operator

Matrixelemente am $\boldsymbol{K}(\boldsymbol{K}')$-Punkt:

Orbital	A, s	A, p_x	A, p_y	A, p_z	B, s	B, p_x	B, p_y	B, p_z
A, s	s	0	0	0	0	$\pm i\alpha$	α	0
A, p_x	0	0	0	0	$\mp i\alpha$	$-\beta$	$\mp i\beta$	0
A, p_y	0	0	0	0	$-\alpha$	$\mp i\beta$	β	0
A, p_z	0	0	0	0	0	0	0	0
B, s	0	$\mp i\alpha$	$-\alpha$	0	s	0	0	0
B, p_x	$\mp i\alpha$	$-\beta$	$\pm i\beta$	0	0	0	0	0
B, p_y	α	$\pm i\beta$	β	0	0	0	0	0
B, p_z	0	0	0	0	0	0	0	0

α, β: Modell-Parameter; s: relative Energie des s-Orbitals

Eigenwerte und Eigenvektoren

#	E	A, s	A, p_x	A, p_y	A, p_z	B, s	B, p_x	B, p_y	B, p_z
1	$-\gamma_-$	$-\gamma_-$	0	0	0	0	$\mp i\alpha$	α	0
2	$-\gamma_-$	0	$\mp i\alpha$	$-\alpha$	0	$-\gamma_-$	0	0	0
3	-2β	0	$\pm i$	-1	0	0	$\pm i$	1	0
4	0	0	0	0	1	0	0	0	0
5	0	0	0	0	0	0	0	0	1
6	γ_+	γ_+	0	0	0	0	$\mp i\alpha$	α	0
7	γ_+	0	$\mp i\alpha$	$-\alpha$	0	γ_+	0	0	0
8	2β	0	$\mp i$	1	0	0	$\pm i$	1	0

$$\gamma_\pm = \frac{\sqrt{s^2+8\alpha^2} \pm s}{2}$$

Eigenwerte und Eigenvektoren

#	E	A, s	A, p_x	A, p_y	A, p_z	B, s	B, p_x	B, p_y	B, p_z
1	$-\gamma_-$	$-\gamma_-$	0	0	0	0	$\mp i\alpha$	α	0
2	$-\gamma_-$	0	$\mp i\alpha$	$-\alpha$	0	$-\gamma_-$	0	0	0
3	-2β	0	$\pm i$	-1	0	0	$\pm i$	1	0
4	0	0	0	0	1	0	0	0	0
5	0	0	0	0	0	0	0	0	1
6	γ_+	γ_+	0	0	0	0	$\mp i\alpha$	α	0
7	γ_+	0	$\mp i\alpha$	$-\alpha$	0	γ_+	0	0	0
8	2β	0	$\mp i$	1	0	0	$\pm i$	1	0

$$\gamma_\pm = \frac{\sqrt{s^2+8\alpha^2} \pm s}{2}$$

Atomare Spin-Bahn-Kopplung

Aus Dirac-Gleichung:

$$H_{\mathrm{SO}} = \frac{1}{2(m_{\mathrm{e}}c)^2}\left(\left[\nabla V(\boldsymbol{r})\right] \times \boldsymbol{p}\right) \cdot \boldsymbol{S}$$

Für kugelsymmetrisches Potential ($V(\boldsymbol{r}) = V(r)$):

$$\nabla V(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{r}\frac{\partial V(r)}{\partial r}\ \boldsymbol{r}$$

$$\Rightarrow\ H_{\mathrm{SO}} = \frac{1}{2(m_{\mathrm{e}}c)^2}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial V(r)}{\partial r}\ \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}\right) \cdot \boldsymbol{S} = \frac{1}{2(m_{\mathrm{e}}c)^2}\left(\frac{1}{r}\frac{\partial V(r)}{\partial r}\right) \boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{S}$$

Atomare Spin-Bahn-Kopplung

Näherung durch lokale atomare Beiträge:

$$H_{\mathrm{SO}} = \sum_{i,l} P_{il} \xi_l \boldsymbol{L}_i \cdot \boldsymbol{S}_i$$

Matrixelemente: $(X \in A, B)$

$$\begin{aligned}
\langle X, p_i | H_{\mathrm{SO}} | X, s \rangle &= 0 \\
\langle X, p_z | H_{\mathrm{SO}} | X, p_x \rangle &= -i\xi S_y \\
\langle X, p_z | H_{\mathrm{SO}} | X, p_y \rangle &= i\xi S_x \\
\langle X, p_z | H_{\mathrm{SO}} | X, p_z \rangle &= 0
\end{aligned}$$

Vorgriff

Zwei Möglichkeiten für Spin-Bahn-Kopplung in Graphen:

1. intrinsische Spin-Bahn-Kopplung (Dresselhaus-Term, λ_{SO})
2. extrinsische Spin-Bahn-Kopplung (Rashba-Term, λ_{R})
   $\longrightarrow$ erzeugt durch Symmetriebrechung
   (BIA = Bulk Inversion Asymmetry)

Einteilchen Stark-Effekt

Motivation:

- Symmetriebruch
- physikalischer Hintergrund

Externes elektrisches Feld:

$$H_{\mathrm{EF}} = eE \sum_i z_i$$

Matrixelemente: $(X \in A, B)$

$$\begin{aligned} \langle X, p_i | H_{\mathrm{EF}} | X, p_j \rangle &= 0 \\ \langle X, p_z | H_{\mathrm{EF}} | X, s \rangle &= eEz_0 \end{aligned}$$

Störungsrechnung

Gesamter Stör-Hamilton-Operator $\Delta H = H_{\mathrm{SO}} + H_{\mathrm{EF}}$

Entartete Störungsrechnung 2. Ordnung

$$H^{(2)}_{m,n} = \sum_{j \neq 4,5} \frac{\langle m^{(0)} | \Delta H | j^{(0)} \rangle \langle j^{(0)} | \Delta H | n^{(0)} \rangle}{E^{(0)}_{4,5} - E^{(0)}_{j}}$$

Störungsrechnung

Gesamter Stör-Hamilton-Operator $\Delta H = H_{\mathrm{SO}} + H_{\mathrm{EF}}$

Entartete Störungsrechnung 2. Ordnung

$$
\begin{aligned}
H^{(2)}_{m,n} &= \sum_{j\neq 4,5} \frac{\langle m^{(0)}|\Delta H|j^{(0)}\rangle\langle j^{(0)}|\Delta H|n^{(0)}\rangle}{E^{(0)}_{4,5} - E^{(0)}_j} \\
&= \underbrace{\sum_{j\neq 4,5} \frac{\langle m^{(0)}|H_{\mathrm{SO}}|j^{(0)}\rangle\langle j^{(0)}|H_{\mathrm{SO}}|n^{(0)}\rangle}{-E^{(0)}_j}}_{=:H^{(2)}_{m,n}(\mathrm{SO,SO})} + \underbrace{\sum_{j\neq 4,5} \frac{\langle m^{(0)}|H_{\mathrm{SO}}|j^{(0)}\rangle\langle j^{(0)}|H_{\mathrm{EF}}|n^{(0)}\rangle}{-E^{(0)}_j}}_{=:H^{(2)}_{m,n}(\mathrm{SO,EF})} \\
&= \underbrace{\sum_{j\neq 4,5} \frac{\langle m^{(0)}|H_{\mathrm{EF}}|j^{(0)}\rangle\langle j^{(0)}|H_{\mathrm{SO}}|n^{(0)}\rangle}{-E^{(0)}_j}}_{=:H^{(2)}_{m,n}(\mathrm{EF,SO})} + \underbrace{\sum_{j\neq 4,5} \frac{\langle m^{(0)}|H_{\mathrm{EF}}|j^{(0)}\rangle\langle j^{(0)}|H_{\mathrm{EF}}|n^{(0)}\rangle}{-E^{(0)}_j}}_{=0}
\end{aligned}
$$

Berechnung von $H^{(2)}_{A,p_z;B,p_z}(\mathrm{SO},\mathrm{SO})$

$$H^{(2)}_{A,p_z;B,p_z}(\mathrm{SO},\mathrm{SO}) =$$

$$= \sum_{j\neq 4,5} \frac{\langle A, p_z|H_{\mathrm{SO}}|j^{(0)}\rangle\langle j^{(0)}|H_{\mathrm{SO}}|B, p_z\rangle}{-E_j^{(0)}}$$

$$= \frac{\langle A, p_z|H_{\mathrm{SO}}|1^{(0)}\rangle\langle 1^{(0)}|H_{\mathrm{SO}}|B, p_z\rangle}{-E_1^{(0)}} + \frac{\langle A, p_z|H_{\mathrm{SO}}|2^{(0)}\rangle\langle 2^{(0)}|H_{\mathrm{SO}}|B, p_z\rangle}{-E_2^{(0)}}$$

$$+ \frac{\langle A, p_z|H_{\mathrm{SO}}|3^{(0)}\rangle\langle 3^{(0)}|H_{\mathrm{SO}}|B, p_z\rangle}{-E_3^{(0)}} + \frac{\langle A, p_z|H_{\mathrm{SO}}|6^{(0)}\rangle\langle 6^{(0)}|H_{\mathrm{SO}}|B, p_z\rangle}{-E_6^{(0)}}$$

$$+ \frac{\langle A, p_z|H_{\mathrm{SO}}|7^{(0)}\rangle\langle 7^{(0)}|H_{\mathrm{SO}}|B, p_z\rangle}{-E_7^{(0)}} + \frac{\langle A, p_z|H_{\mathrm{SO}}|8^{(0)}\rangle\langle 8^{(0)}|H_{\mathrm{SO}}|B, p_z\rangle}{-E_8^{(0)}}$$

Berechnung von $H^{(2)}_{A,p_z;B,p_z}(\mathrm{SO},\mathrm{SO})$

$$H^{(2)}_{A,p_z;B,p_z}(\mathrm{SO},\mathrm{SO}) =$$

$$= \sum_{j\neq 4,5} \frac{\langle A,p_z|H_{\mathrm{SO}}|j^{(0)}\rangle\langle j^{(0)}|H_{\mathrm{SO}}|B,p_z\rangle}{-E_j^{(0)}}$$

$$= \underbrace{\frac{\langle A,p_z|H_{\mathrm{SO}}|1^{(0)}\rangle\langle 1^{(0)}|H_{\mathrm{SO}}|B,p_z\rangle}{-E_1^{(0)}}}_{=0} + \underbrace{\frac{\langle A,p_z|H_{\mathrm{SO}}|2^{(0)}\rangle\langle 2^{(0)}|H_{\mathrm{SO}}|B,p_z\rangle}{-E_2^{(0)}}}_{=0}$$

$$+ \frac{\langle A,p_z|H_{\mathrm{SO}}|3^{(0)}\rangle\langle 3^{(0)}|H_{\mathrm{SO}}|B,p_z\rangle}{-E_3^{(0)}} + \underbrace{\frac{\langle A,p_z|H_{\mathrm{SO}}|6^{(0)}\rangle\langle 6^{(0)}|H_{\mathrm{SO}}|B,p_z\rangle}{-E_6^{(0)}}}_{=0}$$

$$+ \underbrace{\frac{\langle A,p_z|H_{\mathrm{SO}}|7^{(0)}\rangle\langle 7^{(0)}|H_{\mathrm{SO}}|B,p_z\rangle}{-E_7^{(0)}}}_{=0} + \frac{\langle A,p_z|H_{\mathrm{SO}}|8^{(0)}\rangle\langle 8^{(0)}|H_{\mathrm{SO}}|B,p_z\rangle}{-E_8^{(0)}}$$

Berechnung von $H^{(2)}_{A,p_z;B,p_z}(\mathrm{SO},\mathrm{SO})$

$$H^{(2)}_{A,p_z;B,p_z}(\mathrm{SO},\mathrm{SO}) =$$

$$\sum_{j\neq 4,5} \frac{\langle A,p_z|H_{\mathrm{SO}}|j^{(0)}\rangle\langle j^{(0)}|H_{\mathrm{SO}}|B,p_z\rangle}{-E_j^{(0)}}$$

$$= \frac{1}{4\beta}\Big[\langle A,p_z|H_{\mathrm{SO}}|A,p_x\rangle\langle B,p_x|H_{\mathrm{SO}}|B,p_z\rangle + i\langle A,p_z|H_{\mathrm{SO}}|A,p_x\rangle\langle B,p_y|H_{\mathrm{SO}}|B,p_z\rangle$$

$$+i\langle A,p_z|H_{\mathrm{SO}}|A,p_y\rangle\langle B,p_x|H_{\mathrm{SO}}|B,p_z\rangle - \langle A,p_z|H_{\mathrm{SO}}|A,p_y\rangle\langle B,p_y|H_{\mathrm{SO}}|B,p_z\rangle\Big]$$

$$= -\frac{\xi^2}{4\beta}(S_x + iS_y)^2 = -\frac{\xi^2}{4\beta}\underbrace{(S_+)^2}_{=0} = 0$$

$$\langle A,p_z|H_{\mathrm{SO}}|A,p_x\rangle = -i\xi S_y$$
$$\langle A,p_z|H_{\mathrm{SO}}|A,p_y\rangle = i\xi S_x$$

Berechnung von $H^{(2)}_{A,p_z;B,p_z}(\mathrm{SO},\mathrm{EF})$ und $H^{(2)}_{A,p_z;B,p_z}(\mathrm{EF},\mathrm{SO})$

$$H^{(2)}_{A,p_z;B,p_z}(\mathrm{SO},\mathrm{EF}) + H^{(2)}_{A,p_z;B,p_z}(\mathrm{EF},\mathrm{SO}) =$$

$$= \sum_{j\neq 4,5} \frac{\langle m^{(0)}|H_{\mathrm{SO}}|j^{(0)}\rangle\langle j^{(0)}|H_{\mathrm{EF}}|n^{(0)}\rangle}{-E_j^{(0)}} + \sum_{j\neq 4,5} \frac{\langle m^{(0)}|H_{\mathrm{EF}}|j^{(0)}\rangle\langle j^{(0)}|H_{\mathrm{SO}}|n^{(0)}\rangle}{-E_j^{(0)}}$$

$$= i\frac{eEz_0\xi}{\alpha}(S_x - iS_y) = 2i\underbrace{\frac{eEz_0\xi}{2\alpha}}_{=:\lambda_\mathrm{R}}S_-$$

$$= 2i\lambda_\mathrm{R}S_-$$

λ_R: extrinsische Kopplungskonstante (Rashba-Konstante)

$$\langle A,p_z|H_{\mathrm{SO}}|A,p_x\rangle = -i\xi S_y$$
$$\langle A,p_z|H_{\mathrm{SO}}|A,p_y\rangle = i\xi S_x$$
$$\langle A,p_z|H_{\mathrm{EF}}|A,s\rangle = eEz_0$$

Gesamtergebnis für $H^{(2)}_{A,p_z;B,p_z}$

Insgesamt:

$$\begin{aligned} H^{(2)}_{A,p_z;B,p_z} &= H^{(2)}_{A,p_z;B,p_z}(\mathrm{SO},\mathrm{SO}) + H^{(2)}_{A,p_z;B,p_z}(\mathrm{SO},\mathrm{EF}) + H^{(2)}_{A,p_z;B,p_z}(\mathrm{EF},\mathrm{SO}) \\ &= 2i\lambda_\mathrm{R} S_- \end{aligned}$$

Matrixelemente für Spin-Anteil der Wellenfunktion:

$$\begin{aligned} \langle\uparrow|2i\lambda_\mathrm{R} S_-|\uparrow\rangle &= 0 \\ \langle\uparrow|2i\lambda_\mathrm{R} S_-|\downarrow\rangle &= 0 \\ \langle\downarrow|2i\lambda_\mathrm{R} S_-|\uparrow\rangle &= 2i\lambda_\mathrm{R} \\ \langle\downarrow|2i\lambda_\mathrm{R} S_-|\downarrow\rangle &= 0 \end{aligned}$$

Matrixelemente $H^{(2)}_{A,p_z;A,p_z}$ und $H^{(2)}_{B,p_z;B,p_z}$

$$H^{(2)}_{A,p_z;A,p_z} = \underbrace{\frac{|s|\xi^2}{8\alpha^2}}_{=:\lambda_{\mathrm{SO}}}(2S_z - 1) = -\lambda_{\mathrm{SO}} + 2\lambda_{\mathrm{SO}} S_z$$

$$H^{(2)}_{B,p_z;B,p_z} = -\lambda_{\mathrm{SO}} - 2\lambda_{\mathrm{SO}} S_z$$

λ_{SO}: intrinsische Kopplungskonstante (Dresselhaus-Konstante)

Matrixelemente der Spin-Bahn-Kopplung

Orbital	$A, p_{z,\uparrow}$	$A, p_{z,\downarrow}$	$B, p_{z,\uparrow}$	$B, p_{z,\downarrow}$	$A, p_{z,\uparrow}$	$A, p_{z,\downarrow}$	$B, p_{z,\uparrow}$	$B, p_{z,\downarrow}$
$A, p_{z,\uparrow}$	0	0	0	0	$-2\lambda_{\mathrm{SO}}$	0	0	$2i\lambda_{\mathrm{R}}$
$A, p_{z,\downarrow}$	0	$-2\lambda_{\mathrm{SO}}$	$2i\lambda_{\mathrm{R}}$	0	0	0	0	0
$B, p_{z,\uparrow}$	0	$-2i\lambda_{\mathrm{R}}$	$-2\lambda_{\mathrm{SO}}$	0	0	0	0	0
$B, p_{z,\downarrow}$	0	0	0	0	$-2i\lambda_{\mathrm{R}}$	0	0	$-2\lambda_{\mathrm{SO}}$
	K-Punkt				K'-Punkt			

Matrixelemente der Spin-Bahn-Kopplung

Orbital	$A, p_{z,\uparrow}$	$A, p_{z,\downarrow}$	$B, p_{z,\uparrow}$	$B, p_{z,\downarrow}$	$A, p_{z,\uparrow}$	$A, p_{z,\downarrow}$	$B, p_{z,\uparrow}$	$B, p_{z,\downarrow}$
$A, p_{z,\uparrow}$	0	0	0	0	$-2\lambda_{\mathrm{SO}}$	0	0	$2i\lambda_{\mathrm{R}}$
$A, p_{z,\downarrow}$	0	$-2\lambda_{\mathrm{SO}}$	$2i\lambda_{\mathrm{R}}$	0	0	0	0	0
$B, p_{z,\uparrow}$	0	$-2i\lambda_{\mathrm{R}}$	$-2\lambda_{\mathrm{SO}}$	0	0	0	0	0
$B, p_{z,\downarrow}$	0	0	0	0	$-2i\lambda_{\mathrm{R}}$	0	0	$-2\lambda_{\mathrm{SO}}$
	K-Punkt				K'-Punkt			

Effektiver Hamilton-Operator der Spin-Bahn-Kopplung

$$H_{\mathrm{eff}} = -\lambda_{\mathrm{SO}} + \lambda_{\mathrm{SO}}\sigma_z\tau_z S_z + \lambda_{\mathrm{R}}(\sigma_x\tau_z S_y - \sigma_y S_x)$$

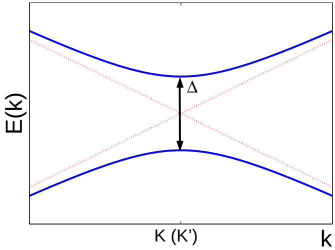
Bandstruktur

Effektiver Hamilton-Operator:

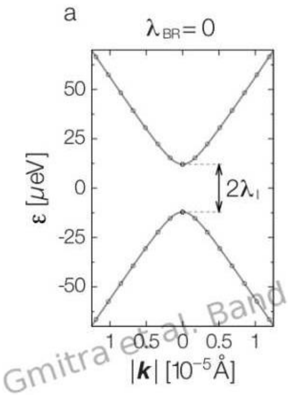
$$H_{\text{eff}} = -\lambda_{\text{SO}} + \lambda_{\text{SO}}\sigma_z\tau_z S_z + \lambda_{\text{R}}(\sigma_x\tau_z S_y - \sigma_y S_x)$$

Energielücke:

$$\Delta = \begin{cases} 2\lambda_{\text{SO}} & \lambda_{\text{R}} = 0 \\ 2(\lambda_{\text{SO}} - \lambda_{\text{R}}) & 0 < \lambda_{\text{R}} < \lambda_{\text{SO}} \\ 0 & \lambda_{\text{R}} > \lambda_{\text{SO}} \end{cases} \qquad 2\lambda_{\text{SO}} \approx 1\mu\text{eV}$$



Gmitra *et al.*, 21. April 2009



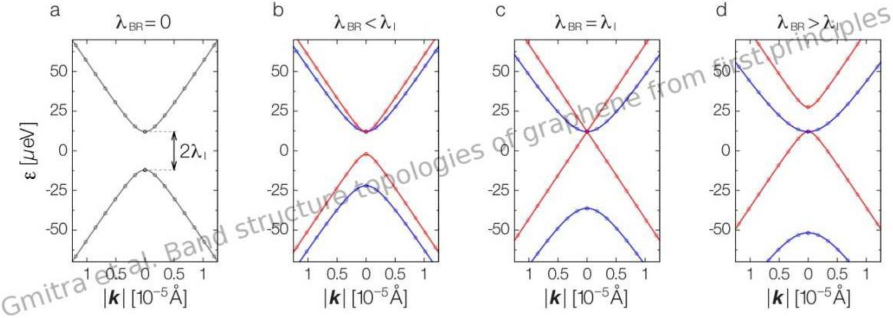
Gmitra *et al.*, arXiv:0904:3315v1

- *d*-Orbitale dominieren Aufspaltung
- intrinsische Aufspaltung:

$$2\lambda_{\mathrm{SO/I}} = 24\ \mu\mathrm{eV}$$

- Dirac-Kegel werden in abgerundete Kegel aufgespalten
- 2-fache Entartung der Bänder

Gmitra *et al.*, 21. April 2009



- Zusammenspiel zwischen intrinsischer und extrinsischer Spin-Bahn-Kopplung
- Gap hängt vom Verhältnis $\lambda_{\mathrm{R/BR}}$ zu $\lambda_{\mathrm{SO/I}}$ ab

$\Rightarrow$ Bandstruktur z.B. durch elektrisches Gate einstellbar

Zusammenfassung

- Tight-Binding Modell: *s*- und *p*-Orbitale
- Störungstheoretische Behandlung der Spin-Bahn-Kopplung liefert die Kopplungskonstanten:

$$\lambda_{\mathrm{SO}} = \frac{|s|\xi^2}{8\alpha^2} \qquad \lambda_{\mathrm{R}} = \frac{eEz_0\xi}{2\alpha}$$

Dresselhaus-Konstante Rashba-Konstante

- Spin-Bahn-Kopplung führt zu Energie-Lücke
- Größenordnung der Aufspaltung wird durch neueste Ergebnisse in Frage gestellt.

Quellen

- Min *et al.*, *Phys. Rev. B* **74**, 165310 (2006)
- Gmitra *et al.*, arXiv:0904:3315v1 [cond-mat.mtrl-sci] 21 Apr 2009