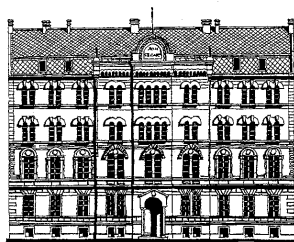


Diplomski rad

Relaksacija spina u kvantnim  
tačkama dopiranim jednim  
magnetnim atomom

Student: Marko Petrović

Mentor: Nenad Vukmirović



Fizički fakultet  
Univerzitet u Beogradu

*Ovaj diplomski rad urađen je u Laboratoriji za primenu računara u nauci Instituta za fiziku u Beogradu. Posebno bih želeo da se zahvalim dr Nenadu Vukmiroviću na strpljenju i pomoći da ovaj posao privedem kraju. Takođe, veliku zahvalnost dugujem svojoj porodici za безусловnu podršku koju su mi pružali tokom svih godina studija.*

*U Beogradu, Oktobra 2011*

*Marko Petrović*

# Sadržaj

<b>1</b>	<b>Uvod</b>	<b>1</b>
1.1	Spintronika i kvantne tačke . . . . .	1
1.2	Cilj rada . . . . .	2
<b>2</b>	<b>Teorijski model</b>	<b>4</b>
2.1	Talasna funkcija . . . . .	4
2.2	Osnovni hamiltonijan . . . . .	5
2.3	Elektron-fonon interakcija . . . . .	6
2.4	Računanje vremena relaksacije . . . . .	8
<b>3</b>	<b>Numerički rezultati</b>	<b>12</b>
3.1	Dijagonalizacija Hamiltonijana . . . . .	12
3.2	Zeemanovo cepanje . . . . .	13
3.3	Uticao spoljašnjeg polja . . . . .	16
3.4	Uticao dimenzija kvantne tačke . . . . .	21
<b>4</b>	<b>Zaključak</b>	<b>25</b>
<b>A</b>	<b>Pomoćni računi</b>	<b>26</b>
A.1	Rešavanje Šredingerove jednačine . . . . .	26
A.2	Komutacija $\hat{H}$ i $\hat{F}_z$ . . . . .	27
A.3	Analitička rešenja za form faktor . . . . .	28
	<b>Literatura</b>	<b>31</b>

# 1 Uvod

U ovom odeljku opisani su osnovni motivi i definisani problemi kojima se ovaj diplomski rad bavi. U prvom delu dat je kratak opis kvantnih tačaka i spintronike kao nove discipline u razvoju, dok je u drugom predstavljen cilj samog rada.

## 1.1 Spintronika i kvantne tačke

Rad savremenih elektronskih uređaja bazira se na jednoj jednostavnoj osobini elektrona, a to je njegovo naelektrisanje. Pored naelektrisanja, elektron ima i spinske stepene slobode i trenutno se ulažu veliki naponi, kako teorijske, tako i eksperimentalne prirode sa ciljem kontrole i manipulacije ovim stepenima slobode u realnim materijalima.

*Spintronika*, ili spinska elektronika, ima za cilj da razume interakciju između spina čestice u nekom materijalu i njenog okruženja (ostale čestice, kristalna rešetka) i da to znanje iskoristi za proizvodnju korisnih uređaja, na primer spinskih tranzistora. Osnovni problemi sa kojima se spintronika suočava su kako uspostaviti ili detektovati neravnotežnu spinsku populaciju, odnosno stanje u kojem većina nosilaca ima određenu orijentaciju spina, kao i koliko dugo se dato stanje održava, odnosno posle koliko vremena se sistem vraća u ravnotežno stanje spinske popunjenosti.

Istraživači u oblasti spintronike koriste metode i rezultate iz različitih disciplina savremene fizike, od fizike poluprovodnika i optike, do fizike superprovodnika i mezoskopskih sistema<sup>1</sup>. Takođe ona uspostavlja vezu između ovih oblasti i na taj način daje bolji uvid u procese koji se dešavaju u samim materijalima.

Jedan od objekata koji se često proučava u oblasti spintronike i od koga se puno očekuje su kvantne tačke. Najjednostavnija definicija kvantne tačke je da je to nanostruktura u kojoj su nosioci naelektrisanja (elektroni ili šupljine) ograničeni u sve tri prostorne dimenzije. Kvantnu tačku možemo da razlikujemo od kvantne žice, kod koje su nosioci ograničeni u dve dimenzije, dok se slobodno kreću u trećoj, ili recimo od kvantne jame gde je ograničenje u samo jednoj dimenziji. Zbog ove svoje osobine kvantne tačke su veoma zanimljivi objekti za teorijsko proučavanje, jer ispoljavaju diskretnu strukturu energetskih nivoa i mogu se posmatrati kao veštački atomi.

---

<sup>1</sup>Mezoskopska fizika je podoblast fizike čvrstog stanja koja proučava sisteme čije se dimenzije kreću u rasponu od nekoliko nanometara do nekoliko mikrona.

Postoji nekoliko tipova kvantnih tačaka, koji se međusobno razlikuju kako po načinu proizvodnje tako i po potencijalnoj primeni. Tip sa kojim se susrećemo u ovom radu su takozvane samo-organizovane, koje se dobijaju nanošenjem, jednog sloja materijala na drugi osnovni sloj. Tipičan primer je kvantna tačka sastavljena od CdTe koji se oblaže na osnovu koja sadrži cink (ZnTe).

Dimenzije ovih objekata kreću se od nekoliko nanometara u pravcu rasta, do nekoliko desetina nm u bočnom pravcu. Oblik je takođe nepravilan i moguće su razne varijacije.

Moguće primene kvantnih tačaka su u proizvodnji efikasnijih solarnih panela, tranzistora, LED dioda, diodnih lasera, pa čak i u biologiji kao agensi za dobijanje kvalitetnijih prikaza procesa u ćelijama. Još jedna primena je i u budućim kvantnim računarima, gde bi se koristile kao qubit-i.

Nedavno razvijene metode proizvodnje omogućavaju da se u pojedinačnu kvantnu tačku ugradi atom Mangana. Ovaj atom je specifičan po tome što u poslednjoj ljusci ima pet nesparenih elektrona, sa maksimalnom mogućom projekcijom spina od  $\frac{5}{2}$ . Eksperimenti vršeni nad ovakvim sistemom su pokazali da je moguće izvršiti inicijalizaciju, odnosno postavljanje, i kontrolu spinskih stanja pojedinačnog Mn atoma.

Korišćenjem lasera sa određenom polarizacijom moguće je podesiti spinsko stanje Mn atoma optičkim putem [1], [2], [3]. Mehanizam po kojem se ovaj proces odigrava još uvek nije precizno utvrđen, ali postoji nekoliko mogućih objašnjenja.

## 1.2 Cilj rada

Osnovni cilj ovog diplomskog rada je da se izračunaju vremena relaksacije, odnosno verovatnoće promene spinskih stanja kako za elektrone, tako i za Mn atom u kvantnoj tački. Takođe pored računa potrebno je utvrditi zavisnost vremena relaksacije od relevantnih parametara (dimenzije kvantne tačke, spoljašnje polje) i dati objašnjenje date zavisnosti.

Bitno je naglasiti da je ovo prvi put da se razmatra relaksacija spina manganovog atoma u kvantnoj tački. Upotrebljen je takozvani model spinske nečistoće [4], gde je Mn atom tretiran kao nečistoća postavljena u elektronsku gustinu raspodele.

Takođe, u većini relevantnih radova koji se bave kvantnim tačkama, osnovni oblik kvantne tačke je cilindar. Zbog rotacione simetrije, postoji degeneracija elektronskih energetske nivoa, što ne odslikava realnu fizičku

situaciju. Kako bi preciznije opisali elektronska stanja u kvantnoj tački uzet je oblik kvadra, čime se data degeneracija gubi.

Dobijeni rezultati su na kraju diskutovani u svetlu postojećih eksperimentalnih rezultata iz literature.

## 2 Teorijski model

U ovom delu su teorijski opisani procesi zaslužni za relaksaciju spina Mn atoma. Prvo je opisan mehanizam mešanja spinskih stanja Mn sa orbitalnim stanjima elektrona, a zatim je perturbativno uvedena elektron-fonon interakcija kao jedan od mogućih načina relaksacije, s' obzirom da direktna interakcija sa fononima ne može da dovede do promene manganovog spina.

### 2.1 Talasna funkcija

Tipična kvantna tačka, iako mala u dimenzijama, sadrži oko  $10^6$  atoma. Egzaktno rešavanje svojstvenog problema ovog mnogočestičnog sistema nije moguće i zato se mora pribеći izvesnim aproksimacijama. Zbog prirode problema koji proučavamo, odnosno interakcije spina Mn atoma i elektrona, jedini podatak koji je nama potreban je jednočesticna talasna funkcija elektrona.

U slučaju kvantnih tačaka nije moguće u potpunosti primeniti Blohovu teoremu o periodičnosti talasne funkcije. Umesto toga pojavljuje se takozvana anvelopna funkcija, koja je sporo promenljiva i koja moduliše inače periodičnu funkciju. Ukupna talasna funkcija jednaka je proizvodu anvelopne funkcije i Blohove funkcije sa periodom Bravaisove rešetke. Anvelopnu funkciju ćemo dobiti rešavanjem Šredingerove jednačine za česticu u kutiji dimenzija kvantne tačke.

Kao što je već navedeno u uvodu, za oblik kvantne tačke uzet je kvadar, dimenzija  $L_x=15\text{nm}$ ,  $L_y=14\text{nm}$ ,  $L_z=3\text{nm}$ . Ovo je često rešavan problem u kvantnoj mehanici. Čestica je ograničena potencijalom:

$$U(\vec{r}) = \left\{ \begin{array}{l} 0 \quad 0 < r_i < L_i \quad (i = x, y, z) \\ \infty \quad \text{u ostalom prostoru} \end{array} \right\}$$

dok se za anvelopne funkcije (nadalje funkcije stanja) dobijaju:

$$\psi_{\vec{n}}(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}} \sin\left(\frac{\pi n_x}{L_x} x\right) \sin\left(\frac{\pi n_y}{L_y} y\right) \sin\left(\frac{\pi n_z}{L_z} z\right)$$

sa energijom

$$E_{\vec{n}} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m_e^*} \left[ \frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right]$$

Detaljno analitičko rešenje ovog problema dato je u dodatku. Pošto se elektron ne može smatrati potpuno slobodnim, masu elektrona je potrebno zameniti efektivnom masom elektrona u CdTe koja je jednaka  $m_e^* = k \cdot m_0$ , gde je  $m_0$  masa elektrona u mirovanju, a  $k=0.106$  (na osnovu [5]).

Brojevi pobude  $n_x, n_y$  i  $n_z$  mogu da se koriste da označe određeno stanje elektrona tako da se funkcija stanja može napisati i preko njih

$$\psi_{\vec{n}}(x, y, z) = |n_x n_y n_z\rangle$$

## 2.2 Osnovni hamiltonijan

Osnovni hamiltonijan se sastoji iz tri dela i može se predstaviti kao:

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_e - \hat{H}_B - \hat{H}_{Mn-e}$$

Prvi član je kinetička energija elektrona izražena u formalizmu druge kvantizacije:

$$\hat{H}_e = \sum_{i=1}^n \sum_{\sigma} E_{i,\sigma} \hat{c}_{i,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{i,\sigma}, \quad \sigma = (\uparrow, \downarrow) \quad i = (n_{ix}, n_{iy}, n_{iz})$$

Suma se vrši po svim stanjima elektrona počevši od osnovnog ( $i=1$ ), do n-tog stanja za različite orijentacije spina. Kreacioni (anhilacioni) operatori su dati sa  $\hat{c}_{i,\sigma}^{\dagger}$  ( $\hat{c}_{i,\sigma}$ ) i deluju na vakuum tako što stvaraju (uništavaju) elektron u orbitalnom stanju  $|n_{ix}, n_{iy}, n_{iz}\rangle$  sa spinom  $\sigma$ . Izraz za  $E_{i,\sigma}$  je dat u prethodnom odeljku.

Drugi član je hamiltonijan za Zeemanovo cepanje, pošto se tačka nalazi u spoljašnjem magnetnom polju, usmerenom duž z-ose

$$\hat{H}_B = \mu_B g_e B \hat{S}_z + \mu_B g_{Mn} B \hat{M}_z.$$

Jačina spoljašnjeg polja je B, dok su  $\hat{S}_z$  ( $\hat{M}_z$ ) operatori projekcije spina elektrona (Mn atoma) na z osu. Takođe  $g_e$  i  $g_{Mn}$  su Landeovi g faktori za elektron i Mn atom i njihove vrednosti su  $g_e = -1.67$ ,  $g_{Mn} = 2.02$  (prema [5]). Borov magneton je  $\mu_B = 5.788 \cdot 10^{-5} \frac{\text{eV}}{\text{T}}$ .

Poslednji član hamiltonijana je interakcija koja je zaslužna za mešanje spinskih stanja elektrona i Mn atoma:

$$\hat{H}_{Mn-e} = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n J_{ij}(\vec{R}) \left[ (\hat{c}_{i,\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{j,\uparrow} - \hat{c}_{i,\downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{j,\downarrow}) \hat{M}_z + \hat{c}_{i,\downarrow}^{\dagger} \hat{c}_{j,\uparrow} \hat{M}^+ + \hat{c}_{i,\uparrow}^{\dagger} \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{M}^- \right],$$



gde su  $\hat{M}^+$  i  $\hat{M}^-$  operatori podizanja i spuštanja spina Mn atoma i oni deluju na standardni bazis kao:

$$\hat{M}^+|km\rangle = \sqrt{k(k+1) - m(m+1)}|km+1\rangle$$

$$\hat{M}^-|km\rangle = \sqrt{k(k+1) - m(m-1)}|km-1\rangle,$$

pa će za spin Mn-a od  $\frac{5}{2}$  ova dva operatora biti reprezentovana kao:

$$\hat{M}^+ = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{5} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{8} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{8} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{5} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

i

$$\hat{M}^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{5} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{8} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{8} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{5} & 0 \end{pmatrix}$$

Član  $J_{ij}(\vec{R})$  predstavlja jačinu interakcije izmene između elektrona i Mn atoma i može se predstaviti kao  $J_{ij}(\vec{R}) = J_c \psi_{\vec{n}_i}^*(\vec{R}) \psi_{\vec{n}_j}(\vec{R})$ , gde je  $J_c$  konstanta kuplovanja ( $J_c = 15 \text{ eV} \cdot \text{Å}$ , prema [5]), dok je  $\vec{R}$  položaj Mn atoma unutar kvantne tačke. Atom je postavljen približno na sredini kvantne tačke, tako da je  $R_x = 7.4 \text{ nm}$ ,  $R_y = 6.9 \text{ nm}$ ,  $R_z = 1.6 \text{ nm}$ .

### 2.3 Elektron-fonon interakcija

Nakon dijagonalizacije osnovnog Hamiltonijana, o čemu će biti više reči u sledećem odeljku, dobijena svojstvena stanja će u sebi sadržati različite talasne funkcije elektrona, kao i projekcije spina Mn i mogu se predstaviti kao:

$$|\Psi_\alpha\rangle = \sum_{n,s,m} c_{n,s,m}^\alpha |n\rangle |s\rangle |m\rangle,$$

gde  $|n\rangle$  označava orbitalno stanje elektrona ( $|n\rangle = |n_x n_y n_z\rangle$ ),  $|s\rangle$  spinsko stanje elektrona ( $|s\rangle = |+\rangle$  ili  $|s\rangle = |-\rangle$ ), a  $|m\rangle$  spinsko stanje Mn. Energija ovih stanja je:

$$\hat{H}_0|\Psi_\alpha\rangle = \epsilon_\alpha|\Psi_\alpha\rangle \quad \alpha = 1, 2, 3, \dots$$

Da bi se opisao prelaz, odnosno promena određenog spinskog stanja Mn atoma, mora se uvesti interakcija koja će prevoditi ceo sistem iz jednog svojstvenog stanja u drugo. Pošto je energetska razlika između nivoa razmatranog prelaza veoma mala, idealan kandidat za ovaj proces je elektron-fonon interakcija, odnosno relaksacija preko akustičkih fonona [6], [7], [4]. Zbog velikih vrednosti energije, optički fononi ne mogu da dovedu do razmatranog prelaza, pa se zato interakcija sa njima može zanemariti.

Postoje dva moguća načina interakcije elektrona sa fononima. Prvi je preko takozvanog deformacionog potencijala, dok je drugi preko piezo polja. Za svaki od ova dva tipa interakcije postoje tri moguće mode oscilovanja rešetke, jedna longitudinalna i dve transverzne, međutim doprinos ovih moda interakciji nije isti, pa se tako na primer transverzne oscilacije mogu zanemariti prilikom interakcije usled deformacionog potencijala.

Hamiltonijan za energiju fonona je isti za oba tipa interakcije i može se predstaviti kao:

$$\hat{H}_{ph} = \sum_{\vec{q}, \lambda} \hbar \omega_{\vec{q}, \lambda} \hat{b}_{\vec{q}, \lambda}^\dagger \hat{b}_{\vec{q}, \lambda},$$

gde su  $\hat{b}_{\vec{q}, \lambda}^\dagger$  ( $\hat{b}_{\vec{q}, \lambda}$ ) operatori kreacije (anhilacije) fonona sa talasnim vektorom  $\vec{q}$  i energijom  $\hbar\omega_{\vec{q}, \lambda}$ . Indeks  $\lambda$  ( $\lambda = 1, 2, 3$ ) prebrojava različite mode oscilovanja.

Disperziona relacija, odnosno veza između talasnog vektora i energije fonona je za oba tipa interakcije linearna<sup>2</sup> i data je sa  $|\vec{q}| = \frac{\omega_{\vec{q}, \lambda}}{v_\lambda}$ , gde je  $v_\lambda$  brzina zvuka za datu modu. Brzina prostiranja longitudinalnih oscilacija je  $v_{la} = 3083 \frac{m}{s}$ , dok je za transverzne  $v_{ta} = 1847 \frac{m}{s}$ . Podaci za brzine su uzeti iz [8].

Interakcija fonona sa elektronom u kvantnoj tački je data preko hamiltonijana:

$$\hat{H}_{ep} = \sum_{\vec{q}, \lambda} M_{\vec{q}, \lambda} (\hat{b}_{\vec{q}}^\dagger + \hat{b}_{-\vec{q}}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}}$$

Član  $M_{\vec{q}, \lambda}$  se naziva matrica rasejanja i zavisi od načina na koji elektron interaguje sa fononima. Kod interakcije usled deformacionog potencijala ovaj član je proporcionalan sa  $\sqrt{q}$ , dok je za interakciju preko piezo polja  $M_{\vec{q}, \lambda} \sim$

<sup>2</sup>Pošto se radi o akustičkim fononima

$\frac{1}{\sqrt{q}}$ . Takođe, smatra se da samo longitudinalni fononi doprinose interakciji preko deformacionog potencijala, dok se kod piezo polja moraju razmatrati sve tri mode oscilovanja. Izrazi za svaki od ovih članova su:

$$\begin{aligned} |M_{\vec{q},\lambda=1}^{Def}|^2 &= \frac{\hbar D^2 |\vec{q}|}{2V \rho v_{la}} \\ |M_{\vec{q},\lambda=1}^{Piezo}|^2 &= \frac{\hbar \xi (3q_x q_y q_z)^2}{v_{la} |\vec{q}|^7} \\ |M_{\vec{q},\lambda=2,3}^{Piezo}|^2 &= \frac{\hbar \xi}{v_{ta}} \left( \frac{q_x^2 q_y^2 + q_y^2 q_z^2 + q_z^2 q_x^2}{|\vec{q}|^5} - \frac{(3q_x q_y q_z)^2}{|\vec{q}|^7} \right), \end{aligned}$$

gde je  $\xi = \frac{32\pi^2 e^2 h_{14}^2}{\kappa^2 V \rho}$ , a  $\vec{q} = (q_x, q_y, q_z)$ .  $D$  je konstanta deformacionog potencijala ( $D=5.1eV$ ),  $\rho$  je gustina materijala za CdTe ( $\rho = 4850 \frac{kg}{m^3}$ ),  $V$  je zapremina sistema,  $e$  je naelektrisanje elektrona ( $e = 1.6 \cdot 10^{-19} C$ ),  $h_{14}$  je piezoelektrična konstanta ( $h_{14} = 3.94 \cdot 10^8 \frac{V}{m}$ ), a  $\kappa$  je statička dielektrična konstanta ( $\kappa = 9.6$ ). Svi podaci su preuzeti iz [9].

## 2.4 Računanje vremena relaksacije

Pošto je interakcija elektrona sa fononima energetski znatno slabija od svih članova u osnovnom hamiltonijanu, ona se može smatrati perturbacijom, pa se verovatnoća prelaza između dva stanja može računati Fermijevim zlatnim pravilom. Ova verovatnoća se često naziva i *brzina relaksacije* i označava se sa  $\Gamma_{i \rightarrow f}$ , dok se takođe koristi i pojam vremena relaksacije  $\tau_{if} = \frac{1}{\Gamma_{if}}$ . Brzina relaksacije se može izraziti kao:

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{q}, \lambda} |M_{\vec{q}, \lambda}|^2 |\langle \Psi_f | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | \Psi_i \rangle|^2 \times (\bar{n}_{\vec{q}, \lambda} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}) \delta(\epsilon_f - \epsilon_i \pm \hbar \omega_{\vec{q}, \lambda})$$

Poslednji član odražava činjenicu da energija prilikom prelaza mora biti očuvana, odnosno da je razlika energija između nivoa jednaka energiji fonona.

Znak  $\pm$  zavisi od toga da li je fonon nestao ili nastao, dok je  $\bar{n}_{\vec{q}, \lambda}$  srednji broj fonona u stanju  $(\vec{q}, \lambda)$ , na temperaturi  $T$  i dat je Boze raspodelom:

$$\bar{n}_{\vec{q}, \lambda} = \frac{1}{e^{\frac{\hbar \omega_{\vec{q}, \lambda}}{K_B T}} - 1}$$

Deo koji potiče od talasnih funkcija se naziva i form faktor i može se razviti po vektorima starog bazisa:

$$\begin{aligned}
\langle \Psi_f | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} | \Psi_i \rangle &= \sum_{\substack{n' s' m' \\ n s m}} c_{n' s' m'}^f * c_{n s m}^i \langle n' s' m' | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} | n s m \rangle \\
&= \sum_{\substack{n' s' m' \\ n s m}} c_{n' s' m'}^f * c_{n s m}^i \delta_{s, s'} \delta_{m, m'} \langle n' | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} | n \rangle \\
&= \sum_{n' n s m} C_{n' n s m}^{if} \langle n' | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} | n \rangle
\end{aligned}$$

Član  $\langle n' | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} | n \rangle$  se može dalje zapisati, uzimajući u obzir da su svi pravci nezavisni:

$$\begin{aligned}
\langle n' | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} | n \rangle &= \langle n'_x n'_y n'_z | e^{i(q_x x + q_y y + q_z z)} | n_x n_y n_z \rangle \\
&= \frac{8}{V} \prod_{i=x,y,z} \int_0^{L_i} \sin\left(\frac{n'_i \pi}{L_i} x_i\right) e^{i q_i x_i} \sin\left(\frac{n_i \pi}{L_i} x_i\right) dx_i
\end{aligned}$$

Form faktor se može obeležiti i kao  $I_{if}(q_x, q_y, q_z)$  pa je izraz za brzinu relaksacije:

$$\Gamma_{i \rightarrow f} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\vec{q}, \lambda} |M_{\vec{q}, \lambda}|^2 |I_{if}(q_x, q_y, q_z)|^2 \times \left(\bar{n}_{\vec{q}, \lambda} + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\right) \delta(\epsilon_f - \epsilon_i \pm \hbar\omega_{\vec{q}, \lambda})$$

Sa sume po  $\vec{q}$  u prethodnom izrazu može se preći na integral u prostoru talasnih vektora:

$$\sum_{\vec{q}} \rightarrow \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3 \vec{q},$$

pri čemu će  $\delta$ -funkcija ograničiti integraciju po celom prostoru na sferu poluprečnika  $q_0$  gde je:

$$q_0 = \frac{|E_i - E_f|}{\hbar v_{la}(ta)},$$

a  $E_i$  i  $E_f$  su energije početnog i krajnjeg stanja.

Iz prethodno rečenog jasno je da se brzina relaksacije dobija usrednjavanjem funkcije  $I_{if}(q_x, q_y, q_z)$  po sferi poluprečnika  $q_0$  (slika 1.1). Sa Dekartovog koordinatnog sistema prelazi se na sferne koordinate, tako da brzine relaksacije za moguće načine interakcije postaju:

$$\frac{1}{\tau_d} = M_{dl} q_{dl}^3 \int \int \sin \theta |\langle \Psi_f | e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} | \Psi_i \rangle|^2 d\theta d\varphi$$

$$\frac{1}{\tau_{pl}} = M_{pl} q_{pl} \int \int \sin^5 \theta \cos^2 \theta \sin^2 \varphi \cos^2 \varphi \cdot |\langle \Psi_f | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | \Psi_i \rangle|^2 d\theta d\varphi$$

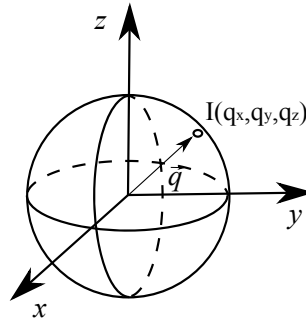
$$\frac{1}{\tau_{pt}} = M_{pt} q_{pt} \int \int (\sin^5 \theta \sin^2 \varphi \cos^2 \varphi + \sin^3 \theta \cos^2 \theta - 9 \sin^5 \theta \cos^2 \theta \sin^2 \varphi \cos^2 \varphi) |\langle \Psi_f | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | \Psi_i \rangle|^2 d\theta d\varphi$$

Koeficijenti  $M_{dl}$ ,  $M_{pl}$  i  $M_{pt}$  se mogu predstaviti kao:

$$M_{dl} = \frac{\hbar D^2}{2V \rho v_{la}} \frac{V}{8\pi^3} \frac{1}{\hbar v_{la}} \frac{2\pi e}{\hbar} = \frac{D^2}{8v_{la}^2 \rho} \frac{e}{\hbar \pi^2}$$

$$M_{pl(pt)} = \frac{32\pi^2 e^2 h_{14}^2 \hbar}{\kappa^2 \rho V v_{la}(ta)} \frac{V}{8\pi^3} \frac{2\pi}{\hbar} \frac{e}{\hbar v_{la}(ta)} = \frac{8e}{\rho \hbar} \left( \frac{e h_{14}}{\kappa v_{la}(ta)} \right)^2$$

Zbog složenosti oblika funkcije  $I_{if}$  prethodna tri integrala je veoma teško rešiti analitičkim putem. Umesto toga u ovom radu je prihvaćen drugačiji pristup. Prvo su analitičkim putem dobijeni pojedinačni članovi u sumi za  $I_{if}$ , odnosno  $\langle n' | e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} | n \rangle$  (ceo postupak je dat u dodatku), zatim su numeričkim putem računane brzine relaksacije.



Slika 1: Sfera po kojoj se vrši integracija

Uveden je parametar podele ( $d$ ), kojim je sfera podeljena na male deliće čija je površina  $\Delta P = q_0^2 \sin \theta \Delta \theta \Delta \varphi$ , gde je  $\Delta \theta = \frac{\pi}{d}$ ,  $\Delta \varphi = \frac{2\pi}{d}$ .

Prethodno usrednjavanje je vršeno preko sume  $\sum_{\theta, \varphi} I_{if}(\theta, \varphi) \Delta P$ . Preciznost ovog računa zavisi od veličine  $d$ . Za velike vrednosti ovog parametra, prethodna suma konvergira ka traženom integralu.

Na ovaj način dobijena je verovatnoća da sistem pređe iz stanja  $|\Psi_i\rangle$  u stanje  $|\Psi_f\rangle$ . U realnim sistemima koji se nalaze na određenoj temperaturi sistem se u početnom trenutku može naći u proizvoljnom stanju. Za svako stanje postoji određena verovatnoća da bude popunjeno. Ako želimo da kažemo koliko je prosečno vreme za koje elektron ili Mn atom promene projekciju svog spina, potrebno je da izvršimo usrednjavanje po svim početnim stanjima. Tako se srednja brzina relaksacije dobija kao:

$$\Gamma_{sr} = \tau_{sr}^{-1} = \sum_i f_i \sum_f \Gamma_{i \rightarrow f},$$

gde je za svako početno stanje ( $i$ ) računata suma po svim mogućim finalnim stanjima ( $f$ ) i ovaj doprinos je pomnožen sa težinom pri usrednjavanju:

$$f_i = C e^{-\frac{E_i}{k_B T}}$$

Konstanta  $C$  je uvedena zbog normiranja i jednaka je:

$$C = \frac{1}{\sum_i e^{-\frac{E_i}{k_B T}}}$$

### 3 Numerički rezultati

U ovom odeljku predstavljeni su dobijeni numerički rezultati. Pre računanja vremena relaksacije, prvo je bilo potrebno rešiti svojstveni problem osnovnog hamiltonijana, što je opisano ukratko u prvom delu, a zatim slede i rezultati od najvećeg interesa za ovaj rad. Relaksacija spina Mn atoma je razmatrana odvojeno od relaksacije spina elektrona. Za Mn atom je posmatran pojedinačan prelaz, dok je za elektron vršeno usrednjavanje po prvih šest nivoa i po svim  $F_z$ . Uzeto je da se kvantna tačka nalazi na sobnoj temperaturi od  $T=295$  K.

#### 3.1 Dijagonalizacija Hamiltonijana

Prilikom rešavanja svojstvenog problema osnovno pitanje je koje funkcije uzeti za početna bazisna stanja, odnosno kolike će biti dimenzije matrice hamiltonijana.

Elektron u određenom orbitalnom stanju može da ima dve projekcije spina i kuplovaće se sa Mn atomom koji ima šest spinskih stanja. Zato jednoj orbitalnoj funkciji elektrona odgovara 12 mogućih funkcija stanja.

Pravilo prilikom rešavanja svojstvenih problema ovog tipa je da se broj razmatranih početnih stanja povećava sve dok svojstvene energije ne počnu da konvergiraju ka određenim vrednostima. U ovom radu je posmatrano prvih 10 orbitalnih stanja elektrona, što daje 120 početnih bazisnih funkcija stanja, odnosno matricu hamiltonijana dimenzija  $120 \times 120$ . Jedna od činjenica koje olakšavaju dijagonalizaciju ove matrice je komutacija sa operatorom projekcije ukupnog spina  $\hat{F}_z = \hat{M}_z + \hat{S}_z$ ,

$$[\hat{H}_0, \hat{F}_z] = 0$$

Dokaz komutacije je dat u dodatku. Pošto je  $F_z$  dobar kvantni broj, matrica osnovnog hamiltonijana je blok-dijagonalna, sa podmatricama na dijagonali čije su dimenzije  $10 \times 10$  (za  $F_z = \pm 3$ ) i  $20 \times 20$  (za ostale  $F_z$ ).

Za dijagonalizaciju ove matrice upotrebljen je LAPACK, softverski paket koji sadrži skup metoda iz linearne algebre, među kojima je i metoda za dijagonalizaciju simetrične realne matrice.

$$\hat{H}_0 = \begin{pmatrix} F_z = -3 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & F_z = -2 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & F_z & 0 \\ 0 & 0 & \dots & F_z = 3 \end{pmatrix}$$

Nakon rešavanja svojstvenog problema dobijaju se energije i stanja sistema elektron-Mn atom. U sledećoj tabeli dati su koeficijenti mešanja i vrednosti energija za prva četiri energetska nivoa, pri vrednosti spoljašnjeg polja od  $B=5\text{T}$ . Zbog dimenzija tabele nije moguće prikazati koeficijente mešanja za svih 20 relevantnih funkcija stanja, ali su dati najdominantniji.

$E_n$ [meV]	$ 1 + -\frac{5}{2}\rangle$	$ 1 - -\frac{3}{2}\rangle$	$ 2 + -\frac{5}{2}\rangle$	$ 2 - -\frac{3}{2}\rangle$	...
428.7	$-2.70 \cdot 10^{-1}$	$9.62 \cdot 10^{-1}$	$-2.31 \cdot 10^{-4}$	$-6.89 \cdot 10^{-5}$	...
429.5	$9.62 \cdot 10^{-1}$	$2.70 \cdot 10^{-1}$	$1.51 \cdot 10^{-4}$	$-2.17 \cdot 10^{-4}$	...
476.0	$1.90 \cdot 10^{-4}$	$1.25 \cdot 10^{-4}$	$-3.46 \cdot 10^{-4}$	$9.99 \cdot 10^{-1}$	...
477.0	$-2.09 \cdot 10^{-4}$	$1.82 \cdot 10^{-4}$	$9.99 \cdot 10^{-1}$	$3.46 \cdot 10^{-4}$	...

### 3.2 Zeemanovo cepanje

Zbog slaganja spina Mn atoma i elektrona, početni spinski prostor  $\mathcal{H}_s^{(el)} \otimes \mathcal{H}_s^{(Mn)}$  se razlaže na dva potprostora. U prvom je ukupan spin  $F_1 = \frac{5}{2} + \frac{1}{2} = 3$ , i pri nultom polju postoji sedam degenerisanih nivoa, dok je u drugom spin  $F_2 = \frac{5}{2} - \frac{1}{2} = 2$  i pri nultom polju je petostruko degenerisan.

Sa uključivanjem polja dolazi do ukidanja degeneracije i iz osnovnog i prvog pobuđenog nastaje 12 novih nivoa. Ovo je takozvano Zeemanovo cepanje. Prelazi koje ćemo posmatrati odigravaju se upravo među ovim nivoima. Reč je o prelazima iz pobuđenih stanja ( $F = 2$ ,  $F_z = 0, \pm 1, \pm 2$ ) u osnovna ( $F = 3$ ,  $F_z = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3$ )

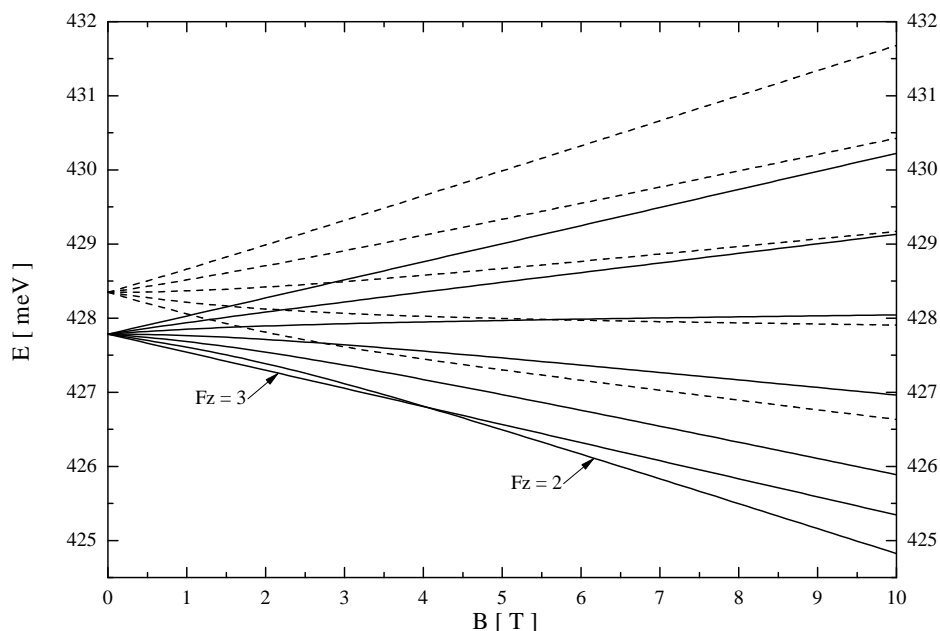


Kao posledica činjenice da fononi ne mogu da interaguju direktno sa spinskim stepenima slobode, perturbacija koju smo koristili ne može da promeni vrednost  $F_z$ , pa su dozvoljeni samo prelazi pri kojima je  $F_z$  očuvano, odnosno  $|F=2, F_z\rangle \rightarrow |F=3, F_z\rangle$  i  $|F=3, F_z\rangle \rightarrow |F=2, F_z\rangle$ .

Sistem u stanju sa najnižom energijom ima najveću vrednost projekcije spina, odnosno spin elektrona i Mn atoma su paralelni. Ovo je posledica feromagnetne interakcije ( $J_{ij}>0$ ). Međutim zbog činjenice da je

$$g_{Mn} > 0 > g_e,$$

pri vrednostima polja većim od 4T, Zeemanov član u hamiltonijanu postaje dominantan i dolazi do ukrštanja nivoa tako da za veće vrednosti polja osnovno stanje nema maksimalnu projekciju spina.



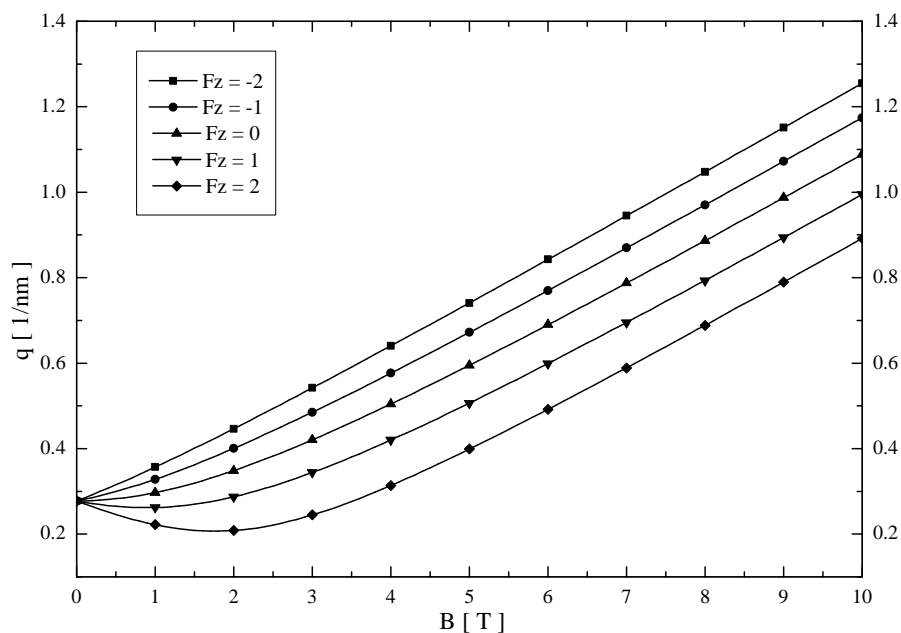
Slika 2: Zeemanovo cepanje energetskih nivoa u kvantnoj tački. Prikazani su podaci za dva najniža nivoa u energetskom spektru. Punom linijom označeni su nivoi sa ukupnim spinom  $F=3$ , dok su isprekidanom označeni oni sa  $F=2$ .

Sa porastom jačine polja razlika energija između nivoa nastalih cepanjem

raste (Slika 2). Sa porastom rastojanja između nivoa, mora doći i do porasta energije fonona koji mogu da izazovu dati prelaz.

Za akustičke fonone važi linearna disperziona relacija. Energija fonona je proporcionalna talasnom vektoru. Kako energija raste skoro linearno i razlike u energijama će biti linearne, pa se tako menja i talasni vektor sa poljem (Slika 3). Iz zavisnosti energije nivoa od polja vidimo da upravo ona mala nelinearnost koja je dovela do ukrštanja nivoa sa različitim  $F$ , sada dovodi do male nelinearnosti talasnog vektora sa poljem.

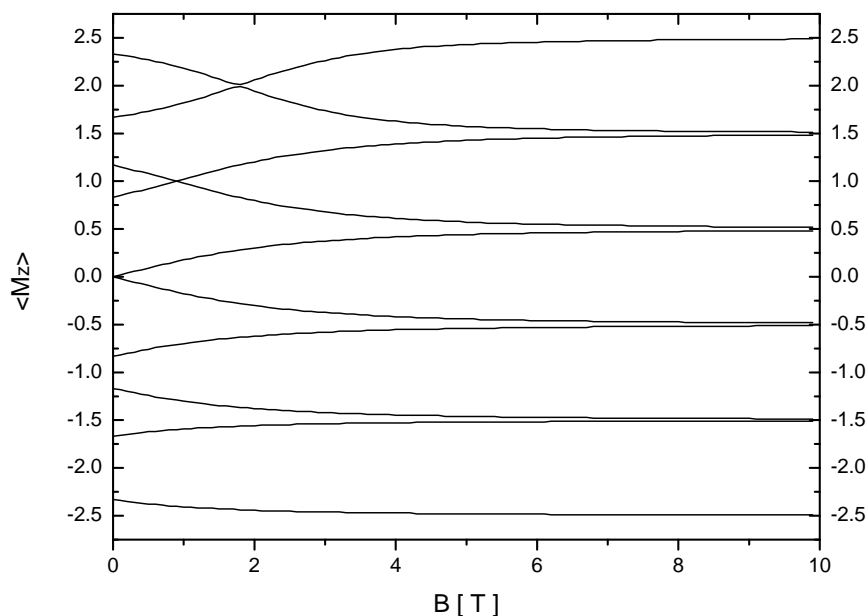
Posto su odnosi talasnih vektora za transversalnu i longitudinalnu modu obrnuto proporcionalni odnosu njihovih brzina, zaključujemo da je oblik zavisnosti  $q$  od  $B$  u ova dva slučaja približno isti.



Slika 3: Zavisnost talasnog vektora longitudinalnih fonona od spoljnjeg magnetnog polja. U pitanju su fononi nastali prilikom prelaza između nivoa sa navedenim  $F_z$

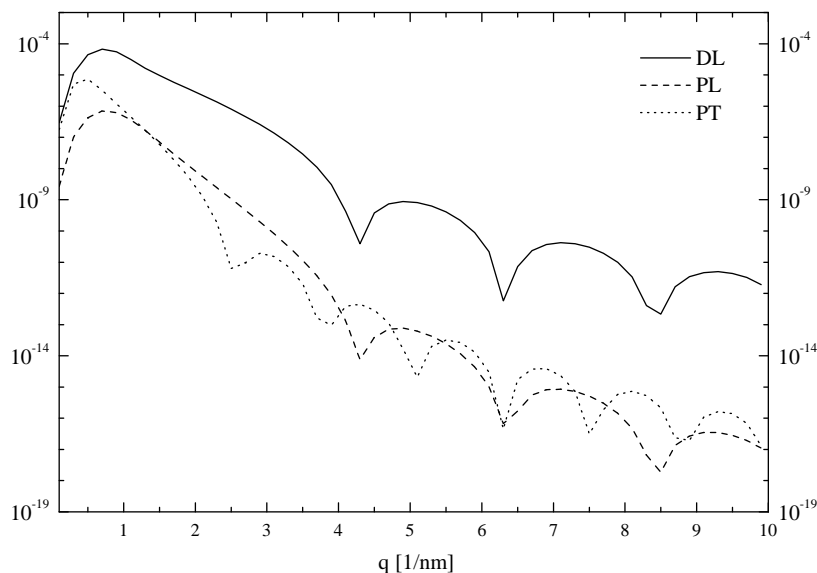
### 3.3 Uticaj spoljašnjeg polja

Spoljašnje polje utiče na vreme relaksacije na dva načina. Prvi je prethodno spomenuta promena talasnog vektora fonona, dok je drugi promena koeficijenata mešanja početnih vektora stanja. Njihov red veličine ostaje isti, ali se njihov relativni odnos menja. Ova promena ne utiče na red veličine vremena relaksacije, pa zato i nije detaljnije razmatrana. Ipak, potrebno je naglasiti da za određene vrednosti polja nije moguće utvrditi dominantno spinsko stanje. Ovo se dešava za male vrednosti polja, kada su nivoi još uvek energetski veoma bliski i kada su početna stanja još uvek dobro izmešana (Slika 4).



Slika 4: Srednja vrednost projekcije manganovog spina za prvih deset energetskih nivoa nastalih Zeemanovim cepanjem.

Uticaj preko talasnog vektora se može podeliti na dva dela. Prvi je direktan, jer talasni vektor figuriše u matrici rasejanja, dok je drugi indirektan i potiče od form faktora. Form faktor je oscilatorna funkcija talasnog vektora (Slika 5). Primenjene vrednosti polja mogu da promene talasni vektor u

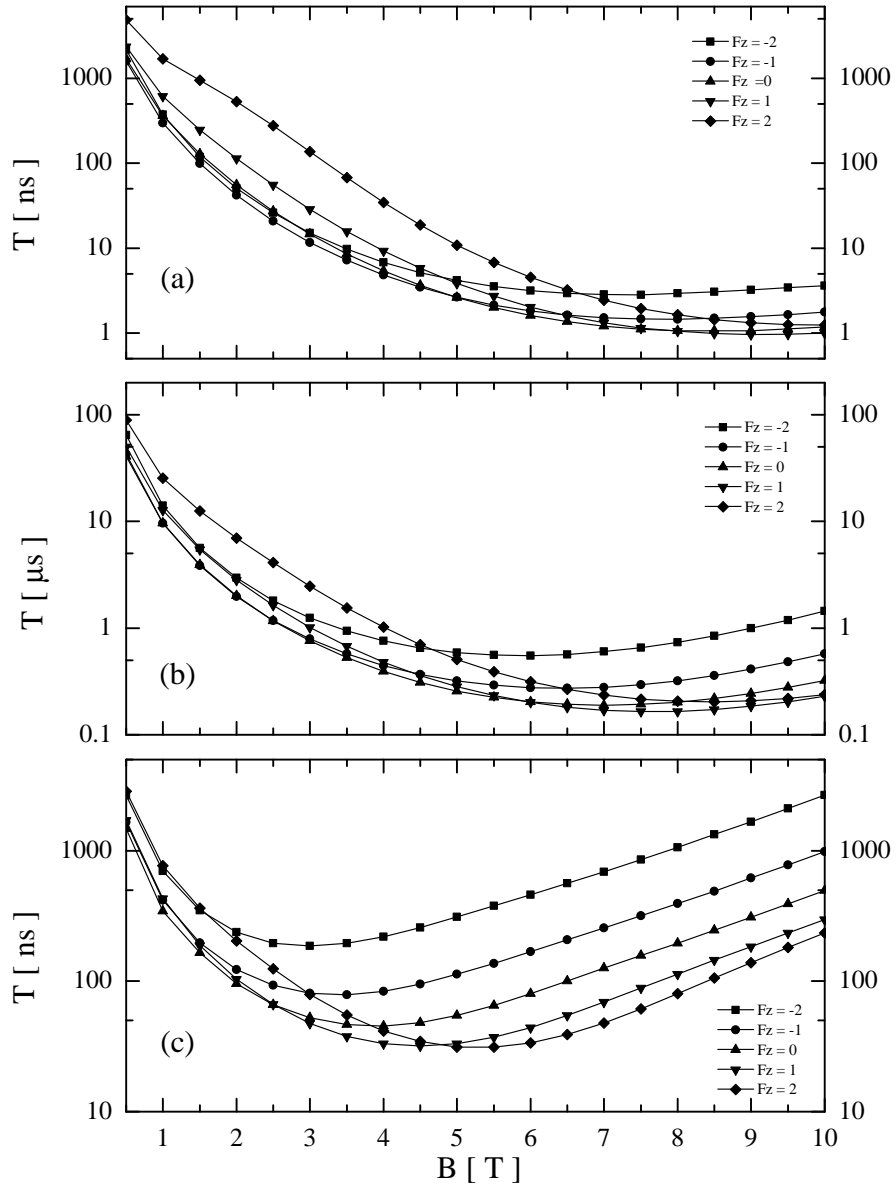


Slika 5: Promene usrednjenog form faktora sa talasnim vektorom za sve tri mode. Uzeti su koeficijenti mešanja za vrednost polja od 5T za prelaz iz prvog pobuđenog u osnovno stanje, dok je  $q$  menjano nezavisno od polja i energije prelaza

opsegu od 0.3 do  $1.0 \frac{1}{nm}$  (početak grafika), tako da se ne očekuje oscilatorna zavisnost vremena relaksacije za date vrednosti polja.

Razmotrimo sada detaljnije promenu spinskog stanja Mn atoma sa poljem (Slika 6). Stanja sa datim  $F_z$  za dominantno spinsko stanje Mn mogu da imaju vrednosti  $F_z - \frac{1}{2}$  ili  $F_z + \frac{1}{2}$  i ispostavlja se da prelaz iz prvog pobuđenog u osnovno stanje odgovara upravo promeni između ove dve vrednosti. Kao što je već rečeno, za slaba polja nije baš moguće reći koje je dominantno spinsko stanje, ali primenjena formula za računanje je i dalje na snazi. Za veće vrednosti polja stanja su jasno definisana i prelaz jasno određuje promenu stanja.

Posmatrajući prethodne grafike može se zaključiti da je relaksacija usled interakcije preko deformacionog potencijala najverovatnija. Brzina relaksacije usled deformacionog potencijala je direktno proporcionalna trećem stepenu talasnog vektora, za razliku od ostalih moda gde je proporcionalna prvom. Takođe dobija se očekivani pad vremena relaksacije sa porastom



Slika 6: Zavisnost vremena relaksacije spina Mn atoma od spoljašnjeg polja. (a) Relaksacija usled deformacionog potencijala. (b) Relaksacija usled piezo polja (za longitudinalne fonone). (c) Relaksacija usled piezo polja (za transverzalne fonone).

početnog polja.

Ono što je posebno zanimljivo prilikom računanja ovih vrednosti je da vremena relaksacije zavise i od broja uračunatih orbitalnih stanja elektrona. Zato je u programu bilo neophodno uzeti bar deset stanja, da bi se dobili konvergentni rezultati. Tipično osnovno stanje za neku vrednost  $F_z$  je oblika:

$$|\Psi\rangle = \alpha^{(1)}|1, +, M_{z1}\rangle + \beta^{(1)}|1, -, M_{z2}\rangle + \alpha^{(2)}|2, +, M_{z1}\rangle + \beta^{(2)}|2, -, M_{z2}\rangle \dots,$$

gde je  $M_{z1} = F_z - \frac{1}{2}$  ( $M_{z2} = F_z + \frac{1}{2}$ ). Koeficijenti mešanja  $\alpha^{(1)}$  i  $\beta^{(1)}$  su za nekoliko redova veličina veći od  $\alpha^{(n)}, \beta^{(n)}$  za  $n \neq 1$ . Prvo pobuđeno stanje takođe možemo napisati kao:

$$|\Psi'\rangle = \alpha'^{(1)}|1, +, M_{z1}\rangle + \beta'^{(1)}|1, -, M_{z2}\rangle + \alpha'^{(2)}|2, +, M_{z1}\rangle + \beta'^{(2)}|2, -, M_{z2}\rangle \dots$$

i ponovo su  $\alpha'^{(1)}, \beta'^{(1)}$  za nekoliko redova veličina veći od  $\alpha'^{(n)}, \beta'^{(n)}$ ,  $n \neq 1$ . Dominantno orbitalno stanje ove dve funkcije je jednako, sto se i očekivalo jer su nastale Zeemanovim cepanjem.

Na osnovu ovog može se očekivati da samo članovi koji potiču od dominantnih orbitalnih stanja (u ovom slučaju je to osnovno stanje) imaju uticaj u form faktoru i da se ostali članovi mogu zanemariti.

Međutim, pošto su stanja  $|\Psi\rangle$  i  $|\Psi'\rangle$  dobijena dijagonalizacijom početnog hamiltonijana, važi da je  $\langle\Psi|\Psi'\rangle = 0$ , odnosno

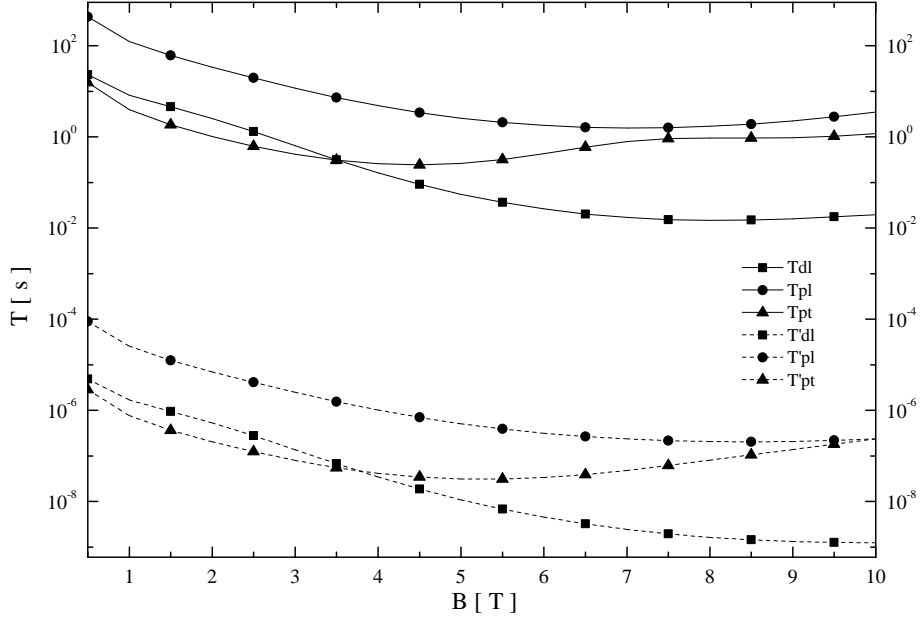
$$\sum_{n=1}^N (\alpha^{*(n)}\alpha'^{(n)} + \beta^{*(n)}\beta'^{(n)}) = 0,$$

a pošto su koeficijenti najveći za  $n = 1$ , dobijamo da je:

$$\alpha^{*(1)}\alpha'^{(1)} + \beta^{*(1)}\beta'^{(1)} \approx 0$$

Odavde zaključujemo da najveći doprinos u form faktoru imaju članovi kod kojih se orbitalna stanja razlikuju, najmanje za  $\pm 1$ . Ovo ima smisla i sa stanovišta relaksacije, jer fononi ne mogu da izazovu prelaze između istih orbitalnih stanja, pa se u razmatranje moraju uzeti bar dva različita orbitalna stanja elektrona.

Ovo je jasno ilustrovano na slici 7 gde su data vremena relaksacije računata na dva načina. U prvom slučaju su posmatrani samo dominantni članovi u talasnoj funkciji, dok su u drugom u obzir uzeti svi članovi. Vremena koja se dobijaju pri ovako gruboj aproksimaciji su daleko od očekivanih i trebalo bi da



Slika 7: Zavisnost vremena relaksacije od spoljašnjeg polja. Posmatran je prelaz iz prvog pobuđenog u osnovno stanje za  $F_z = 2$ . Punom linijom su označena vremena računata aproksimativnom metodom, dok su isprekidanom ona dobijena računanjem celog form faktora.

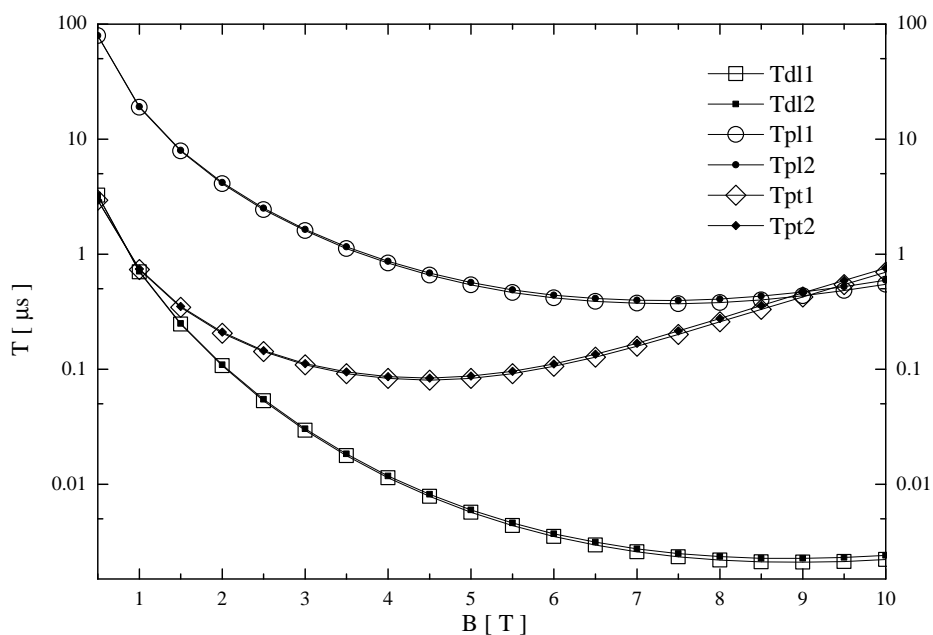
teže ka beskonačnosti za  $\alpha^{*(1)}\alpha'^{(1)} + \beta^{*(1)}\beta'^{(1)} \rightarrow 0$ , odnosno u slučaju hamiltonijana generisanog sa samo jednom orbitalnom funkcijom elektrona. Zbog oblika hamiltonijana koji je zaslužan za perturbaciju, odnosno osobine da je prilikom prelaza  $F_z$  očuvano, vreme relaksacije za spin Mn za neko  $F_z$  jednako je vremenu relaksacije za elektron za to  $F_z$ , tako da se vreme relaksacije za elektron dobija usrednjavanjem po svim vrednostima  $F_z$ . Takođe, za sistem u ravnotežnom stanju na datoj temperaturi postoji određena raspodela mogućih početnih stanja, pa je potrebno izvršiti usrednjavanje i po ovoj raspodeli kako bi se dobilo srednje vreme relaksacije za elektron u kvantnoj tački. U ovom usrednjavanju računati su samo oni prelazi kod kojih je razlika energija manja od 10meV, jer akustički fononi mogu da izazovu samo prelaze između ovih stanja.

Za elektron je moguće računati vremena za dva tipa prelaza, iz  $|-\rangle$  u  $|+\rangle$

i iz  $|+\rangle$  u  $|-\rangle$ . Odnos ova dva vremena je dat kao

$$\tau_{if}^{-1} = e^{\frac{-(E_i - E_f)}{k_B T}} \tau_{fi}^{-1}$$

Na malim temperaturama jedan od ova dva prelaza postaje verovatniji od drugog. U ovom radu proučavana je relaksacija na sobnoj temperaturi, tako da će za male razlike između energetske nivoa između kojih posmatramo prelaz koeficijent proporcionalnosti težiti jedinici, pa je verovatnoća za ova dva tipa prelaza jednaka (Slika 8).



Slika 8: Srednje vreme relaksacije elektrona. Vremena sa indeksom "1" odgovaraju prelazu  $|+\rangle \rightarrow |-\rangle$ , dok vremena sa indeksom "2" prelazu  $|-\rangle \rightarrow |+\rangle$ .

### 3.4 Uticaj dimenzija kvantne tačke

Kao i spoljašnje polje, dimenzije kvantne tačke mogu da utiču na vreme relaksacije na dva načina. Prvi je preko promene energija fonona, odnosno preko talasnog vektora, dok je drugi preko koeficijenata mešanja.



Zbog karakterističnog oblika kvantne tačke posmatrana je promena dimenzija duž  $z$  pravca, pri čemu su ostali parametri ostali nepromenjeni ( za polje je uzeta vrednost od 5T ). Takođe očuvan je i relativni položaj Mn atoma u okviru kvantne tačke.

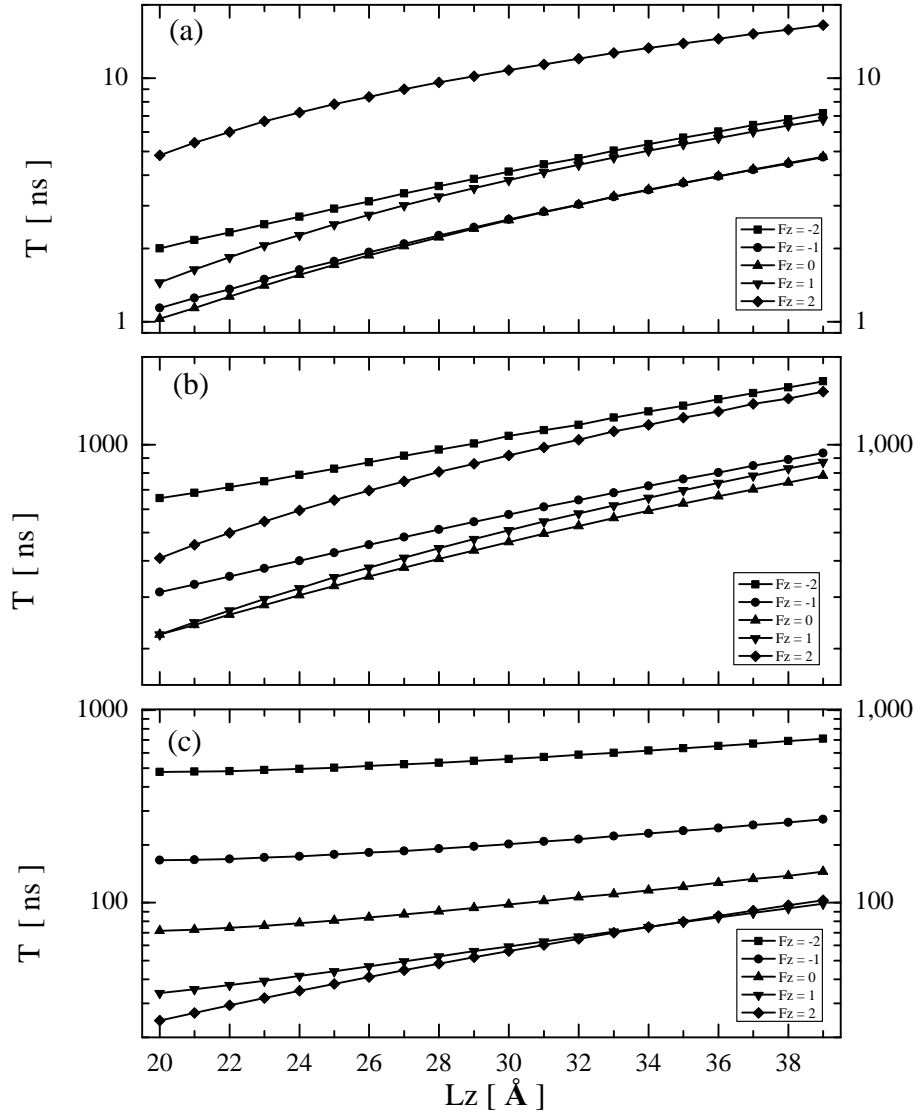
Dimenzije kvantne tačke su najmanje u pravcu  $z$ -ose. Energija potrebna da se tačka pobudi duž ovog pravca je najveća u odnosu na pobude duž  $x$  ili  $y$ . Zato se prvo popunjavaju stanja duž ovih pravaca, dok je duž  $z$  sistem veoma dugo u osnovnom stanju  $n_z=1$ . Za prvih deset orbitalnih stanja, koliko je ovde uzeto u razmatranje, nema pobude duž  $z$ . Ovaj pravac podjednako doprinosi energiji svih nivoa.

Iz prethodno rečenog može da se zaključi da promena dimenzija  $L_z$ , ne može bitno da utiče na vreme relaksacije (Slika 9). Razlog leži u tome što ova promena podigne (ili smanji) energije svih nivoa za podjednak iznos, dok se relativni odnos između energija pojedinačnih nivoa ne menja.

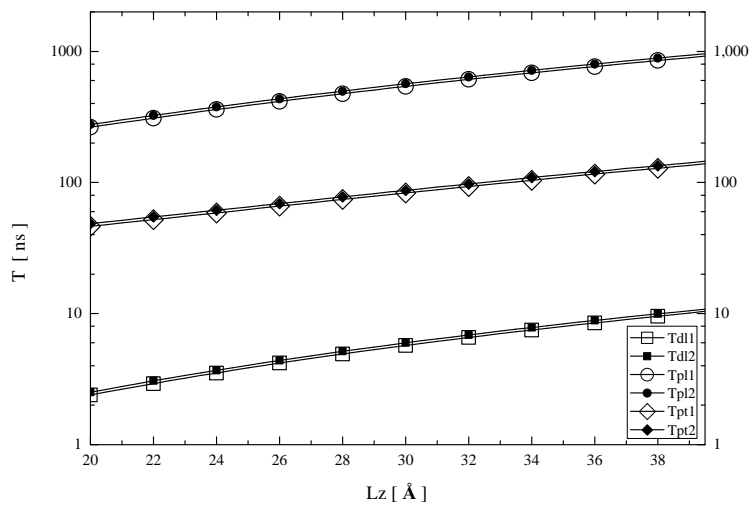
Takođe uticaj na koeficijente mešanja je neznatan. Pošto je relativan položaj Mn atoma ostao nepromenjen, ni konstanta kuplovanja za Mn-elektron interakciju ( $J_{ij}(\vec{R})$ ) se neće promeniti, pa isto važi i za koeficijente mešanja. Da smo kojim slučajem ostavili Mn atom na svom početnom mestu i povećavali dimenzije, verovatnoća da se elektron nađe na mestu Mn atoma bi se menjala i to bi direktno uticalo na stepen mešanja, pa i na vreme relaksacije.

Kao i u prethodnom slučaju moguće je izvršiti urednjavanje po svim  $F_z$  i početnim stanjima kako bi dobili vremena relaksacije elektrona (slika 10). Na osnovu veze između ove dve relaksacije opisane u odeljku vezanom za promene polja, dovoljno je reći da se ni ovde ne uočavaju bitne promene. Zbog date temperature vremena se ponovo skoro poklapaju i relaksacija preko deformacionog potencija je i dalje najverovatnija.

Promene duž  $x$  i  $y$  pravca takođe nemaju uticaj na vremena relaksacije. Generalno možemo da kažemo da pošto smo posmatrali prelaz između Zeemanovih nivoa, kod kojih su orbitalna stanja za dato  $F_z$  jednaka, promene dimenzija ne mogu da utiču na razlike energija između posmatranih nivoa.



Slika 9: Zavisnost vremena relaksacije Mn atoma od dimenzija tačke duž z-ose. (a) Relaksacija usled deformacionog potencijala. (b) Relaksacija usled piezo polja (za longitudinalne fonone). (c) Relaksacija usled piezo polja (za transverzalne fonone).



Slika 10: Srednje vreme relaksacije elektrona u odnosu na dimenzije duž  $z$ . Vremena sa indeksom "1" odgovaraju prelazu  $|+\rangle \rightarrow |-\rangle$ , dok vremena sa indeksom "2" prelazu  $|-\rangle \rightarrow |+\rangle$ .

## 4 Zaključak

Svi relevantni procesi vezani za mešanje spinskih stanja, kao i kasniju relaksaciju obuhvaćeni su predloženim modelom Hamiltonijana. Kao što je već rečeno izbor oblika kvantne tačke, interakcije mešanja ali i posmatranih prelaza nas navodi na konstataciju da relaksacija preko akustičkih fonona mnogo više zavisi od uticaja spoljašnjeg polja nego od dimenzija kvantne tačke.

Predloženi model daje vremena relaksacije u opsegu od  $1\text{ns}$  do  $100\mu\text{s}$  u zavisnosti od tipa interakcije, jačine polja, ali i dimenzija kvantne tačke. Takođe može se zaključiti da je relaksacija usled deformacionog potencijala najdominantniji proces. Dobijeni rezultati su u saglasnosti sa zaključcima iz [10]. U prethodno spomenutom radu se nalaze interpretacije eksperimentalnih rezultata o optičkoj orijentaciji spina.

Povećanje jačine spoljašnjeg polja utiče na energetska razliku između Zeemanovih nivoa, što za posledicu ima povećanje talasnog vektora fonona koji dovodi do prelaza. Vremena relaksacije direktno zavise od ovog talasnog vektora. Što se promene dimenzija tiče, relativan položaj Mn atoma u okviru kvantne tačke se ne menja, pa se ne uočavaju ni promene vremena relaksacije.

Jedan od bitnih neočekivanih rezultata je i da relaksaciji najviše doprinose početna bazisna stanja koja nisu dominantna i da se prilikom računa mora obratiti pažnja na njih, inače se dobijaju vrednosti daleko od očekivanih.

Činjenica da za mala polja nije moguće tačno odrediti projekciju spina Mn, odnosno da računata vremena relaksacije nemaju fizički smisao se ne može protumačiti kao nedostatak izabranog hamiltonijana, jer će pri niskim poljima nivoi uvek biti energetski veoma bliski i nepostojanje dominantnog spinskog stanja je neminovnost.

U budućnosti bi početnom hamiltonijanu trebalo dodati i spin-orbit interakciju, koja dovodi do dodatnog mešanja spina  $\uparrow$  i  $\downarrow$ . Još jedan od parametara koji ovde nije uzet u obzir a koji bi bilo interesantno posmatrati je i položaj Mn atoma. Uspešnost mešanja zavisi od verovatnoće da se slobodan elektron nađe u blizini Mn atoma, pa će i vremena relaksacije zavisiti od ove verovatnoće.

## A Pomoćni računi

### A.1 Rešavanje Šredingerove jednačine

Rešavamo Šredingerovu jednačinu

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x) \right] \psi(x) = E\psi(x)$$

u 1D slučaju za elektron u potencijalu:

$$U(x) = \begin{pmatrix} 0 & 0 < x < L \\ \infty & \text{u ostalom prostoru} \end{pmatrix}$$

Pri čemu u oblasti bez potencijala dobijamo:

$$\psi''(x) + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi(x) = 0 \quad E > 0$$

Rešenje ove diferencijalne jednačine je oblika:

$$\psi(x) = A \sin(k \cdot x) + B \cos(k \cdot x), \quad k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

Pri čemu moraju biti zadovoljeni granični uslovi

$$\psi(0) = \psi(L) = 0,$$

odnosno

$$B = 0 \quad k = \frac{n\pi}{L} \quad (E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m L^2})$$

Koeficijent A dobijamo iz uslova normiranosti talasne funkcije

$$|A|^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L}x\right) dx = 1 \quad \Rightarrow A = \sqrt{\frac{2}{L}}$$

Generalizacijom prethodnog rešenja na sve tri dimenzije dobijamo:

$$\psi(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{L_x L_y L_z}} \sin\left(\frac{n_x \pi}{L_x} x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{L_y} y\right) \sin\left(\frac{n_z \pi}{L_z} z\right)$$

$$E(n_x, n_y, n_z) = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2m} \left[ \frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right]$$

## A.2 Komutacija $\hat{H}$ i $\hat{F}_z$

Treba dokazati da osnovni hamiltonijan komutira sa operatorom projekcije ukupnog spina  $[\hat{H}_0, \hat{F}_z]$ , gde je:

$$\begin{aligned}\hat{H}_0 &= \hat{H}_e - \hat{H}_B - \hat{H}_{Mn-e} \\ \hat{H}_e &= \sum_{i=1}^n \sum_{\sigma} E_{i,\sigma} \hat{c}_{i,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i,\sigma} \\ \hat{H}_B &= \mu_B g_e B \hat{S}_z + \mu_B g_{Mn} B \hat{M}_z \\ \hat{H}_{Mn-e} &= \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^n J_{ij}(\vec{R}) \left[ (\hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\uparrow} - \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}) \hat{M}_z + \hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j,\uparrow} \hat{M}^+ + \hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow} \hat{M}^- \right]\end{aligned}$$

Vidimo da svaki član u hamiltonijanu za kinetičku energiju ne menja vrednost spina, tako da on u spinskom prostoru deluje kao jedinični operator koji komutira sa  $\hat{F}_z$ . Komutacija  $\hat{H}_B$  je takođe očigledna, s' obzirom da  $\hat{S}_z$  i  $\hat{M}_z$  komutiraju sa ukupnom projekcijom spina. Isto može da se kaže i za prva dva člana u  $\hat{H}_{Mn}$ .

Jedini deo hamiltonijana gde je potrebno dati pun dokaz su poslednja dva člana. Iz oblika ovih članova vidimo da će i oni komutirati zato jer oni dovode do spin-flipa, odnosno povećavaju projekciju jednog spina i u isto vreme smanjuju projekciju drugog i obratno. Ovakva interakcija ne dovodi do promene ukupne projekcije spina.

Operatori  $\hat{c}_{i,\downarrow}^\dagger \hat{c}_{j,\uparrow}$  i  $\hat{c}_{i,\uparrow}^\dagger \hat{c}_{j,\downarrow}$  se mogu napisati i kao  $\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j \hat{S}^-$  i  $\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j \hat{S}^+$ , pa je potrebno dokazati komutaciju  $\hat{S}^+ \hat{M}^-$  i  $\hat{S}^- \hat{M}^+$  sa  $\hat{F}_z$ .

$$[\hat{S}^- \otimes \hat{M}^+, \hat{S}_z \otimes \hat{I}_M + \hat{I}_S \otimes \hat{M}_z] =$$

$$\begin{aligned}& [\hat{S}^-, \hat{S}_z] \otimes \hat{M}^+ + \hat{S}^- \otimes [\hat{M}^+, \hat{M}_z] \\ &= -\hat{S}^- \otimes \hat{M}^+ + \hat{S}^- \otimes \hat{M}^+ = 0,\end{aligned}$$

jer je

$$[\hat{S}^\pm, \hat{S}_z] = \pm \hat{S}^\pm \quad [\hat{M}^\pm, \hat{M}_z] = \pm \hat{M}^\pm$$

Dokaz za  $\hat{S}^+ \hat{M}^-$  se dobija po analogiji.

### A.3 Analitička rešenja za form faktor

Potrebno je izračunati član:

$$\langle \Psi_f | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} | \Psi_i \rangle = \sum_{n' n s m} C_{n' n s m}^{if} \langle n' | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} | n \rangle,$$

gde je:

$$\begin{aligned} \langle n' | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} | n \rangle &= \langle n'_x n'_y n'_z | e^{i(q_x x + q_y y + q_z z)} | n_x n_y n_z \rangle \\ &= \frac{8}{V} \prod_{i=x,y,z} \int_0^{L_i} \sin\left(\frac{n'_i \pi}{L_i} x_i\right) e^{iq_i x_i} \sin\left(\frac{n_i \pi}{L_i} x_i\right) dx_i \end{aligned}$$

Ovde imamo proizvod tri integrala koji je moguće rešiti analitički. Rešenje duž jednog pravca dobijamo na sledeći način. Prvo uvodimo smenu:

$$\frac{n'_i \pi}{L_i} = k'_i \quad \frac{n_i \pi}{L_i} = k_i$$

Pa podintegralni izraz postaje:

$$\begin{aligned} \sin k'_i x_i \cdot \sin k_i x_i \cdot e^{iq_i x_i} &= \frac{1}{2} (\cos k^- x_i - \cos k^+ x_i) (\cos q_i x_i + i \sin q_i x_i) \\ &= \frac{1}{2} (\cos k^- x_i \cos q_i x_i - \cos k^+ x_i \cos q_i x_i) \\ &\quad + \frac{i}{2} (\cos k^- x_i \sin q_i x_i - \cos k^+ x_i \sin q_i x_i) \\ &= (R_1^i - R_2^i) + i(I_1^i - I_2^i), \end{aligned}$$

gde je dalje uvedena smena  $k^- = k'_i - k_i$ , ( $k^+ = k'_i + k_i$ ) i iskorišćene su formule za proizvod trigonometrijskih funkcija. Zatim je računata vrednost

svakog od prethodno dobijenih integrala.

$$\begin{aligned}
R_1^i &= \frac{1}{2} \int_0^{L_i} \cos k^- x_i \cos q_i x_i dx_i \\
&= \frac{1}{4} \int_0^{L_i} [\cos(k^- - q_i)x_i + \cos(k^- + q_i)x_i] dx_i \\
&= \frac{1}{4} \frac{\sin(k^- - q_i)x_i}{k^- - q_i} \Big|_0^{L_i} + \frac{1}{4} \frac{\sin(k^- + q_i)x_i}{k^- + q_i} \Big|_0^{L_i} \\
&= \frac{1}{4} \frac{\sin(k^- - q_i)L_i}{k^- - q_i} + \frac{1}{4} \frac{\sin(k^- + q_i)L_i}{k^- + q_i} \\
&= \frac{1}{4} (-1)^{(n_i - n'_i)} \left( -\frac{1}{k^- - q_i} + \frac{1}{k^- + q_i} \right) \sin q_i L_i \\
&= \frac{1}{2} (-1)^{(n_i - n'_i)} \frac{q_i}{q_i^2 - (k^-)^2} \sin(q_i L_i)
\end{aligned}$$

Po analogiji se dobija da je član  $R_2^i$  jednak

$$R_2^i = \frac{1}{2} (-1)^{(n_i + n'_i)} \frac{q_i}{q_i^2 - (k^+)^2} \sin(q_i L_i),$$

dok je imaginarni deo:

$$\begin{aligned}
I_1^i &= \frac{1}{2} \int_0^{L_i} \cos k^- x_i \sin q_i x_i dx_i \\
&= \frac{1}{4} \int_0^{L_i} [\sin(q_i - k^-)x_i + \sin(q_i + k^-)x_i] dx_i \\
&= \frac{1}{4} \frac{\cos(q_i - k^-)x_i}{q_i - k^-} \Big|_0^{L_i} + \frac{1}{4} \frac{\cos(q_i + k^-)x_i}{q_i + k^-} \Big|_0^{L_i} \\
&= \frac{1}{4} \frac{1 - \cos(q_i - k^-)L_i}{q_i - k^-} + \frac{1}{4} \frac{1 - \cos(q_i + k^-)L_i}{q_i + k^-} \\
&= \frac{1}{2} (1 - (-1)^{(n'_i - n_i)} \cos q_i L_i) \frac{q_i}{q_i^2 - (k^-)^2}.
\end{aligned}$$

Član  $I_2^i$  se ponovo dobija po analogiji:

$$I_2^i = \frac{1}{2} \left[ 1 - (-1)^{(n'_i + n_i)} \cos q_i L_i \right] \frac{q_i}{q_i^2 - (k^+)^2}$$



Dobijen je sledeći rezultat:

$$\begin{aligned}\langle n'_i | e^{iq_i x_i} | n_i \rangle &= (R_1^i - R_2^i) + i(I_1^i - I_2^i) \\ &= \Re_i + i\Im_i.\end{aligned}$$

Form faktor između stanja  $n'$  i  $n$  je proizvod prethodnih članova za sve vrednosti  $i$ , odnosno za sve pravce:

$$\begin{aligned}\langle n' | e^{i\mathbf{q}\mathbf{x}} | n \rangle &= \frac{8}{V} \prod_{i=1}^3 [\Re_i + i\Im_i] \\ &= \frac{8}{V} (\Re_1 + i\Im_1) \cdot [\Re_2\Re_3 - \Im_2\Im_3 + i(\Re_2\Im_3 + \Re_3\Im_2)]\end{aligned}$$

i njegov realni deo se može predstaviti kao:

$$Re_{n'n} = \frac{8}{V} [\Re_1(\Re_2\Re_3 - \Im_2\Im_3) - \Im_1(\Re_2\Im_3 + \Re_3\Im_2)]$$

dok je imaginarni

$$Im_{n'n} = \frac{8}{V} [\Im_1(\Re_2\Re_3 - \Im_2\Im_3) + \Re_1(\Re_2\Im_3 + \Re_3\Im_2)]$$

Kvadrat modula ukupnog form faktora je:

$$|\langle \Psi_f | e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} | \Psi_i \rangle|^2 = \left| \sum_{n'nsm} C_{n'nsm}^{if} Re_{nn'} \right|^2 + \left| \sum_{n'nsm} C_{n'nsm}^{if} Im_{nn'} \right|^2$$

Ovo rešenje je dalje iskorišćeno prilikom pisanja programa za računanje vremena relaksacije.

# Literatura

- [1] C. Le Gall, L. Besombes, H. Boukari, R. Kolodka, J. Cibert, and H. Mariette. Optical spin orientation of a single manganese atom in a semiconductor quantum dot using quasidegenerate photoexcitation. *Physical Review Letters*, 102(127402), 2009.
- [2] M. Goryca, T. Kazimierzuk, M. Nawrocki, A. Golnik, J. A. Gaj, P. Koszacki, P. Wojnar, and G. Karczewski. Optical Manipulation of a Single Mn spin in a CdTe-Based Quantum Dot. *Physical Review Letters*, 103(087401), 2009.
- [3] C. Le Gall, R. S. Kolodka, C. L. Cao, H. Boukari, H. Mariette, J. Fernandez-Rossier, and L. Besombes. Optical initialization, readout, and dynamics of a Mn spin in a quantum dot. *Physical Review B*, 81, 2010.
- [4] Gerald D. Mahan. *Many-particle physics*. Plenum Press, New York, 1990.
- [5] Nenad Vukmirović and Ivana Savić. Intraband magneto-optical properties of magnetic quantum dots. *Physical Review B*, 76(245307), 2007.
- [6] Juan I. Climente, Andrea Bertoni, Guido Goldoni, and Elisa Molinari. Directionality of acoustic-phonon emission in weakly confined semiconductor quantum dots. *Physical Review B*, 75(245330), 2007.
- [7] J. L. Cheng, M. W. Wu, and C. Lü. Spin relaxation in GaAs quantum dots. *Physical Review B*, 69(115318), 2004.
- [8] W. Yang and K. Chang. Spin relaxation in diluted magnetic semiconductor quantum dots. *Physical Review B*, 72(075303), 2005.
- [9] Ivana Savić. *Theory and design of intraband quantum cascade structures in a magnetic field*. PhD thesis, The University of Leeds School of Electronic and Electrical Engineering Institute of Microwaves and Photonics, 2006.
- [10] Łukasz Cywiński. Optical orientation of a single mn spin in a quantum dot: Role of carrier spin relaxation. *arxiv1006.1866v2*, 2010.