

Quantendots auf Graphen

Sören Kumkar

Professor G. Burkhard
Betreuer: A. Palyi

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Grundlagen von Quantenbits	1
2.1	Allgemeine Eigenschaften von Quantenpunkten	1
2.2	Quantenpunkte in GaAs	1
2.3	Messung von Spinzuständen	1
3	Quantenpunkte auf Graphen	2
3.1	Einleitung	2
3.2	Graphenbänder	2
3.3	Ausgedehntes 2-dim Graphen	4
4	Zusammenfassung	4

1 Einleitung

Quantendots bieten die Möglichkeit aufbauend auf den quantelten Zuständen der enthaltenen Ladungsträger (Elektronen) sogenannte *Qubits* - Quantenbits zu realisieren. Hierbei wird eine Quantenmechanische Eigenschaft - häufig der Spin von z.B. Elektronen - genutzt um ein Bit zu repräsentieren. In Halbleitermaterialien wie z.B. GaAs wurde dies bereits experimentell untersucht. Ein Problem hierbei ist die Lebensdauer der kohärenten Zustände. Diese ist unter anderem durch Spin-Bahn Kopplung sowie Wechselwirkungen des Elektronenspins mit den Kernspins begrenzt. Die Spin-Bahn Kopplung ist abhängig von der Ordnungszahl der Atome und folglich bei Kohlenstoff gegenüber Gallium oder Arsen relativ gering. Kohlenstoff besteht zu etwa 99% aus dem Isotop ^{12}C welches einen verschwindenden Kernspin besitzt, folglich ist auch die Kernspin-Elektronenspin Wechselwirkung klein. Eine genauere Analyse der Möglichkeiten von Graphen als Basis für Qubits erscheint somit als sinnvoll.

2 Grundlagen von Quantenbits

2.1 Allgemeine Eigenschaften von Quantenpunkten

Wenn man den möglichen räumlichen Aufenthaltsbereich von einzelnen Ladungsträgern auf einen Bereich der gleichen Größenordnung wie ihre DE-BROGLIE-Wellenlänge einschränkt spalten sich die Energie-Eigenwerte der zugehörigen Wellenfunktion in diskrete Energieniveaus auf. Die ist vergleichbar mit den Energieniveaus von Elektronen in einem Atom, jedoch üblicherweise in der Größenordnung von meV. Einen Bereich der diese räumliche Beschränkung von einzelnen Teilchen ermöglicht nennt man *Quantenpunkt*. Über seine Größe lassen sich die Abstände der

Energieniveaus variieren. Wenn man mehrere dieser Quantenpunkte dicht genug zusammen bringt und die Wellenfunktionen enthaltener Teilchen ausreichend überlappen ergibt sich eine Tunnelwahrscheinlichkeit zwischen beiden Punkten, man spricht auch von einer Kopplung von Quantenpunkten (und ihrer quantenmechanischen Zustände).

2.2 Quantenpunkte in GaAs

Quantenpunkte sind in einer Vielzahl von Materialien denkbar, bisherige experimentelle Realisierungen fanden häufig in GaAs statt. Dies lässt sich auf die gute Verfügbarkeit von hochreinem GaAs sowie den Erfahrungen in der Prozessierung von Strukturen auf dieser Basis zurückführen. Die Lebensdauer präparierten, kohärenten Zustände einzelner Elektronen in solchen Strukturen ist jedoch limitiert. Ursachen hierfür sind wie Eingangs erwähnt unter Anderem die Spin-Bahn Kopplung der Elektronen sowie Wechselwirkungen zwischen dem Elektronenspin und den Kernspins der Gitteratome [3].

Eine Mögliche Struktur für zwei gekoppelte Quantenpunkte ist in Abbildung (1) dargestellt. Durch epitaktisches Wachstum wird die Bewegungsfreiheit bereits in einer Dimension eingeschränkt (durch Kombination von Schichten mit unterschiedlicher Bandlücke) und damit ein zweidimensionales Elektronengas definiert. Die zwei verbleibenden Bewegungsrichtungen werden elektrostatisch eingeschränkt (durch Elektroden oder einer geätzter Struktur). Zusätzliche Elektroden ermöglichen die Kopplung zwischen den beiden Punkten zu verändern sowie das Gesamtpotential der Punkte zu verschieben (Verschiebung der Grundzustandsenergie). Die Ladung der Punkte lässt sich durch den Feldeffekt indirekt über Ströme messen, dies ermöglicht eine Aussage ob sich ein Elektron in einem Quantenpunkt befindet oder nicht.

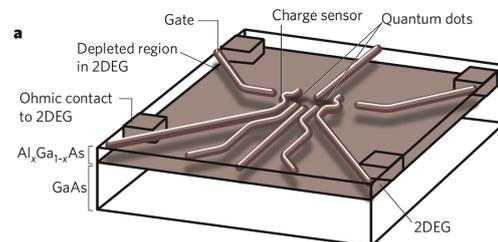


Abbildung 1: Zwei Quantendots in GaAs [1]

2.3 Messung von Spinzuständen

Bei einem in einem Quantenpunkt isoliertes Elektron bietet sich an den Spin desselbigen als Qubit zu nutzen. Allerdings ist die direkte Messung des Spinzustandes nahezu unmöglich, da das mit ihm verbundene Magnetische Moment sehr klein ist. Es wird also versucht den Spinzustand in andere, einfacher zu messende Größen zu transverieren.

Eine Möglichkeit ist die Aufspaltung des Energieniveaus abhängig von der Spineinstellung. Möglich ist dies z.B. durch ein externes Magnetfeld (ZEEMAN-Effekt). Wenn die FERMI-Energie in der Umgebung nun zwischen diesen beiden Energieniveaus liegt ist eine Tunnelung des enthaltenen Elektrons abhängig von seiner Spineinstellung. Durch Beobachtung der Ladung innerhalb des Quantenpunktes lassen sich so Angaben über den Spin machen (Vgl. Abbildung (2))

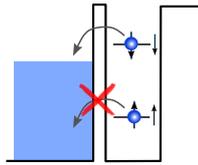


Abbildung 2: Umwandlung von Spinzuständen in Ladung der Quantenpunkte durch Aufspaltung der Energieniveaus der zwei Spinzustände

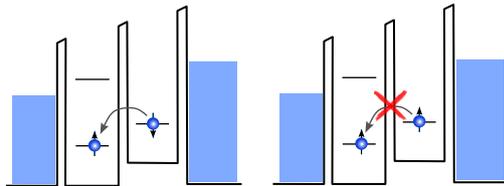


Abbildung 3: Ermittlung von Spinzuständen über die Auswahlregeln

Eine andere Möglichkeit Spinzustände in Ladung zu überführen ist die Ausnutzung von Auswahlregeln (PAULI-Prinzip). Ein Zustand kann nicht von zwei Elektronen besetzt werden die in allen Quantenzahlen übereinstimmen. Dies wird in Abbildung (3) skizziert. Zwei Potentialtöpfe (Quantenpunkte) sind dicht genug beisammen dass es eine endliche Tunnelwahrscheinlichkeit zwischen ihnen gibt. Haben die beiden Elektronen in ihren jeweiligen Töpfen unterschiedliche Spins, so wird das Elektron vom einen Topf in den andern Tunneln sobald das Potential eines Topfes relativ zum andern soweit angehoben wird, dass die Differenz das Potential der COULOMBabstoßung übersteigt. Die Position der Elektronen lässt sich wiederum über die Ladung bestimmen [1].

3 Quantenpunkte auf Graphen

3.1 Einleitung

Graphen bietet im direkten Vergleich mit GaAs den Vorteil einer niedrigeren Ordnungszahl, was zu einer geringeren Spin-Bahn Wechselwirkung führt. Desweiteren verschwindet bei ^{12}C der resultierende Kernspin. Bereits durch diese Eigenschaften müsste Kohlenstoff im Vergleich zu GaAs eine etwa 1000fach höhere Kohärenzzeit aufweisen. Graphen ist bereits ein ausgedehntes 2 dimensionales (näherungsweise) System, somit bleiben (ähnlich wie bei der gewachsenen Struktur auf GaAs) nur noch zwei räumliche Freiheitsgrade.

Diesen Vorteilen stehen auch Probleme gegenüber: Da (unendlich ausgedehntes) Graphen an sich keine Bandlücke aufweist können Elektronen durch eine Potentialbarriere unter bestimmten Umständen mit einer Wahrscheinlichkeit von bis zu 1 hindurchtunneln, vgl. hierzu auch den entsprechenden Vortrag zum Thema KLEIN-Tunneln. Dies macht eine elektrostatische Definition des Quantenpunktes durch z.B. Elektroden erst einmal unmöglich. Ein weiteres Problem kann die \mathbf{K}/\mathbf{K}' -Entartung in den Eigenzuständen der Elektronen darstellen, da sie eine exakte Präparation von ein-Elektronenzuständen verhindert.

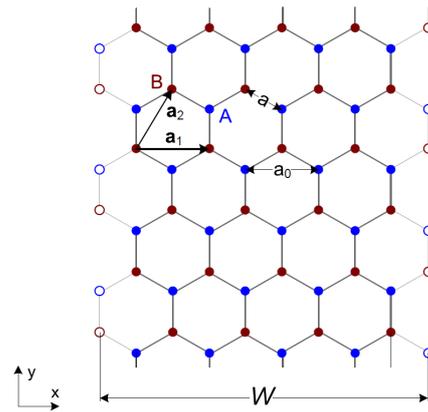


Abbildung 4: Graphen Band mit „armchair“-Rändern

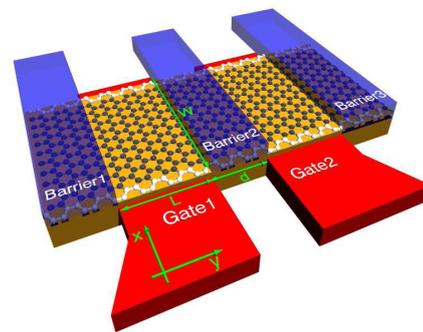


Abbildung 5: Zwei Quantenpunkten auf einem Graphenband der Breite W die durch Barrieren-Potentiale auf die Länge L beschränkt sind.

3.2 Graphenbänder

Wie im entsprechenden Vortrag gezeigt, können mit Bändern aus Graphen mit „armchair“-Rändern [5] (vgl. Abbildung (4)) bei passender Wahl der Breite diese beiden Probleme umgangen werden. Sie zeigen ein halbleiterartiges Verhalten mit einer Bandlücke und die genannte Entartung ist aufgehoben. Eine denkbare Realisation von zwei gekoppelten Quantenpunkten auf einem Graphenband ist in Abbildung (5) dargestellt. Hierbei ist zu beachten dass wir von Beginn an für die Breite W des Bandes nur Werte zulassen die kein ganzzahliges Vielfaches von Drei der Gitterkonstanten darstellen. Dies ist die Bedingung für halbleitendes Verhalten. Die Begrenzung der Punkte in y -Richtung erfolgt durch elektrische Potentiale (Barrieren) die durch Elektroden realisiert werden könnten.

Bei der mathematischen Beschreibung (hier nur für einen einzelnen Quantenpunkt umgeben von zwei Barrieren) starten wir mit der DIRAC-Gleichung für Graphen die wir mit einem y -Abhängigen Potential $V(y)$ ergänzen. Wir nehmen an das dieses Potential im Bereich der Barrieren V_{barrier} entspricht und sonst verschwindet (Stufenfunktion).

$$V(y) = \begin{cases} 0 & 0 \leq y \leq L \\ V_{\text{barrier}} & \text{sonst} \end{cases}$$

Es ergibt sich

$$-i\hbar v \begin{pmatrix} \sigma_x \partial_x + \sigma_y \partial_y & 0 \\ 0 & -\sigma_x \partial_x + \sigma_y \partial_y \end{pmatrix} \Psi + eV(y)\Psi = \varepsilon \Psi$$

wobei $\sigma_{x/y}$ die PAULI-Matrizen sind und Ψ ein vierkomponentiger Spinor (für die Untergitter A und B jeweils die \mathbf{K} und \mathbf{K}' Komponenten).

$$\Psi = \begin{pmatrix} \Psi_A^{(K)} \\ \Psi_B^{(K)} \\ -\Psi_A^{(K')} \\ -\Psi_B^{(K')} \end{pmatrix}$$

Als Lösungsansatz betrachten wir den Bereich der Barrieren und den innerhalb der eigentlichen Quantenpunkte getrennt und passen dann jeweils die Randbedingung an der Grenze an.

$$\Psi_{n,k}^{(\pm)}(x,y) = \chi_{n,k_x,k_y}^{(\pm)}(x) e^{\pm ik_y y} \quad (1)$$

Das (\pm) steht hier für die zwei möglichen Wahlen einer Breite die sich von einem ganzzahligen Vielfachen von drei unterscheidet. Man erkennt die Separation von x - und y -Abhängigkeit. Zu beachten ist dass χ sowohl von k_x als auch von k_y abhängt.

Betrachten wir zunächst die x -Abhängigkeit, welche für beide Bereiche gleichermaßen gültig ist. Die Randbedingungen hier lassen sich wie folgt formulieren ($\alpha = A/B$):

$$\begin{aligned} \Psi_{\alpha}^{(K)}|_{x=0} &= \Psi_{\alpha}^{(K')}|_{x=0} \\ \Psi_{\alpha}^{(K)}|_{x=W} &= e^{\pm 2\pi/3} \cdot \Psi_{\alpha}^{(K')}|_{x=W} \end{aligned}$$

Wie bereits in [5] gezeigt führt dies zu einer Quantisierung des Wellenvektors in x -Richtung

$$q_n \equiv k_x = \frac{(n \pm 1/3)\pi}{W}, \quad n \in \mathbb{Z} \quad (2)$$

Das \pm steht hier wieder für die unterschiedlichen Wahlmöglichkeiten von W . Bei der Lösung in y -Richtung müssen wir nun zwischen den zwei Bereichen unterscheiden: k_y soll eine Lösung in der Barriere kennzeichnen, entsprechend \tilde{k}_y im Bereich mit $V = 0$. Es ergeben sich analog zu [5] die Energieeigenwerte für den Bereich mit $V = 0$

$$\varepsilon = \pm \hbar v \sqrt{q_0^2 + \tilde{k}_y^2}$$

Hieraus lässt sich bereits die Bandlücke bei gegebener Breite für das Band ausrechnen, $E_{gap} = 2\hbar v q_0 \approx 60 \text{meV}$ für $W \approx 30 \text{nm}$. Weiterhin erkennt man dass sich in (2) für beliebige n keine zwei betragsmäßig gleich große Werte für q_n ergeben können (bei festem W). Somit sind die Energieeigenwerte nicht mehr entartet. Im Folgenden betrachten wir den Grundzustand q_0 in x -Richtung. Der Bereich mit $V_{barrier}$ ergibt sich analog (lediglich eine Verschiebung durch das Potential):

$$\begin{aligned} \varepsilon &= eV_{barrier} \pm \hbar v \sqrt{q_0^2 + k_y^2} \\ \Rightarrow k \equiv k_y &= \sqrt{\left(\frac{\varepsilon - eV}{\hbar v}\right)^2 - q_0^2} \end{aligned}$$

Innerhalb dieses Bereiches soll die Wellenfunktion für $y \rightarrow \infty$ verschwinden, dies setzt voraus das k rein imaginär ist, da dann der Exponent in (1) reell wird. Die Bedingung hierfür lautet also

$$\hbar v q_0 > |\varepsilon - eV_{barrier}|$$

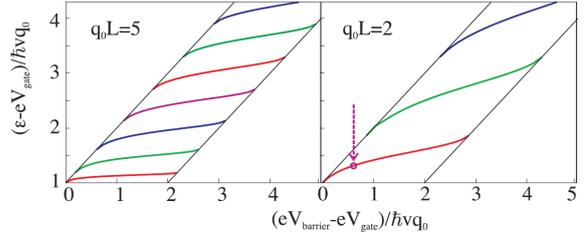


Abbildung 6: Energieeigenwerte in Abhängigkeit des Barrieren-Potentials

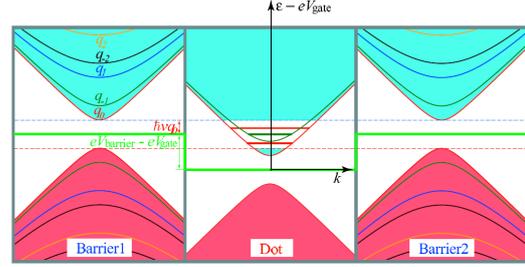


Abbildung 7: Bandstruktur eines Punktes, umgeben von zwei Barrieren

Aus den Anschlussbedingung (Stetigkeit der Wellenfunktion) bei $y = 0$ sowie $y = L$ ergibt sich folgende transzendente Gleichung welche letztendlich lediglich von ε abhängt:

$$\begin{aligned} e^{2i\tilde{k}L} (z_{0,k} - z_{0,\tilde{k}})^2 - (1 - z_{0,k}z_{0,\tilde{k}})^2 &= 0 \quad (3) \\ \text{with } z_{0,k} &= \sqrt{\frac{q_0 + ik}{q_0^2 + k^2}} \end{aligned}$$

Hierbei interessieren uns nur Fälle bei denen \tilde{k} reell ist, da sich ansonsten wie bereits gezeigt keine stehende Welle ergibt. Im Falle von $\tilde{k} = 0$ würde die Lösung innerhalb der Bandlücke liegen, was nicht möglich ist. Die Bedingung hierfür:

$$|\varepsilon - eV_{gate}| \geq \hbar v q_0 > |\varepsilon - eV_{barrier}|$$

Etwas vereinfacht ergibt sich für (3)

$$\tan(\tilde{k}L) = \frac{\hbar v \tilde{k} \sqrt{(\hbar v q_0)^2 - (\varepsilon - eV_{barrier})^2}}{\varepsilon (\varepsilon - eV_{barrier}) - (\hbar v q_0)^2}$$

In Abbildung (6) ist ε in Abhängigkeit der Barrierenspannung für zwei unterschiedliche Längen L geplottet (V_{Gate} ist in unserem Fall nicht vorhanden) (6) zu erkennen. Diese isolierten, nicht entarteten Zustände müssten sich nun als Qubits nutzen lassen. Man erkennt das nur für einen bestimmten Bereich überhaupt Lösungen existieren, und diese dann in y -Richtung gequantelt sind. Der Abstand zweier Eigenenergien vergrößert sich bei abnehmendem L . In Abbildung (7) ist die Bandstruktur eines Quantenpunktes (Dot) umgeben von zwei Barrieren qualitativ gezeichnet. Man erkennt das gequantelte Zustände im Dot innerhalb der Bandlücke der Barrieren liegen, und damit isoliert sind. Die Anzahl der möglichen isolierten Zustände (mit q_0) hängt von der Bandlücke der Barrieren und dem Abstand der Zustände ab, wie auch in Abbildung

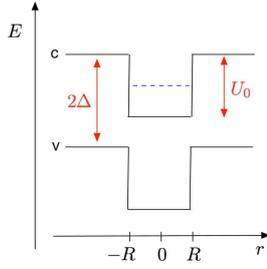


Abbildung 8: Potentialtopf auf ausgedehntem Graphen

3.3 Ausgedehntes 2-dim Graphen

Ausgedehntes Graphen besitzt von sich aus erst einmal keine Bandlücke, was die elektrostatische Definition eines Quantenpunktes unmöglich machen würde. Wir machen deshalb die Annahme eines Terms im Hamiltonoperator, welcher die beiden Untergitter A und B jeweils um einen konstanten Term Δ erhöht bzw. erniedrigt (führt zu einer Bandlücke 2Δ).

$$H_\tau = H_0 + \tau\Delta\sigma_z + U(x,y)$$

mit

$$\begin{aligned} H_0 &= v(\mathbf{p} + e\mathbf{A}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ \mathbf{B} &= \nabla \times \mathbf{A} = (0, 0, B) \\ \tau &= \pm \text{ for } \mathbf{K}/\mathbf{K}' \\ \sigma_z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (4)$$

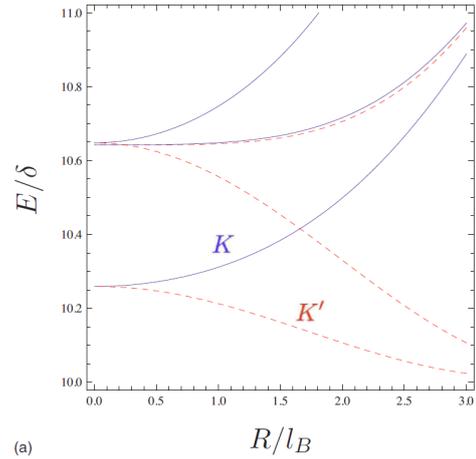
Dieses kann z.B. durch ein passendes Substrat unter dem Graphen erreicht werden. Wir wählen ein Zylindersymmetrisches Potential $U(x,y)$ (Stufenfunktion mit Radius R) welches uns nun den Quantenpunkt im Leitungsband definiert (Vgl. Abbildung (8)). Weiterhin nehmen wir ein parallel zu z -Achse paralleles, homogenes Magnetfeld \mathbf{B} an welches als Vektorpotential \mathbf{A} berücksichtigt wird. Nun erfolgt eine Transformation in Zylinderkoordinaten:

$$H_0 = -iv \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\alpha} \\ e^{i\alpha} & 0 \end{pmatrix} \partial_r + v \begin{pmatrix} 0 & -e^{-i\alpha} \\ e^{-i\alpha} & 0 \end{pmatrix} \left(\frac{1}{r} \partial_\alpha + \frac{ieBr}{2} \right)$$

Da H_τ mit dem Spinoperator $J_z = -i\partial_\alpha + \sigma_z/2$ (genauer der Pseudo-Spinoperator) kommutiert, besitzen sie einen gemeinsamen Satz Eigenzustände von

$$\Psi^\tau(r, \alpha) = e^{i(j-1/2)\alpha} \begin{pmatrix} \chi_A^\tau(r) \\ \chi_B^\tau(r) e^{i\alpha} \end{pmatrix}$$

Dies ist eine nichttriviale Aufgabe, erfolgt letztendlich nach dem gleichen Schema wie in (3.2): Zuerst werden nach Lösungen in beiden Bereichen gesucht und diese dann über die Anschlussbedingungen (Stetigkeit) angepasst. Letztendlich lassen sich die Energieeigenwerte abhängig von dem Magnetfeld darstellen (Abbildung (9)). Man erkennt das hier die Entartung in \mathbf{K}/\mathbf{K}' durch ein Magnetfeld aufgehoben wird, und sich somit exakt definierte Elektronenzustände ergeben.



(a)

Abbildung 9: Energieeigenwerte auf ausgedehntem Graphen abhängig von dem externen Magnetfeld, $\delta = \Delta/10$, $l_B = \sqrt{\hbar/eB}$

4 Zusammenfassung

Auf Grund der genannten Vorteile von Graphen für Quantendots (geringes Atomgewicht, weitgehend Kernspinfreiheit, von sich aus 2 dim) wurden zwei Vorschläge erläutert welche die Probleme in Graphen (verschwindende Bandlücke, Entartung der Energieeigenwerte) lösen könnten. Zum einen die Verwendung von Graphennanobänder mit „armchair“-Rändern, diese würden beide Probleme auf einmal lösen. Zum andern Graphen auf einem Substrat und dem Einsatz eines externen Magnetfeldes. Das Substrat induziert eine Bandlücke und das externe Magnetfeld hebt die Entartung auf.

Theoretisch bietet Graphen somit eine Möglichkeit Qubits in Quantendots zu realisieren.

Literatur

- [1] R. Hanson and D. Awschalom: *Coherent manipulation of single spins in semiconductors*, NATURE Vol 453 (2008)
- [2] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov and A. K. Geim: *The electronic properties of graphene*, REVIEWS OF MODERN PHYSICS, Volume 81 (2009)
- [3] B. Trauzettel, D. V. Bulaev, D. Loss and G. Burkard: *Spin qubits in graphene quantum dots*, NATURE PHYSICS 3, 192-196 (2007)
- [4] P. Recher and J. Nilsson, G. Burkard, B. Trauzettel: *Bound states and magnetic field induced valley splitting in gate-tunable graphene quantum dots*, PHYSICAL REVIEW B 79, 085407 (2009)
- [5] A. Zusan: *Graphen Nanobänder*, Graphen-Seminar UNIVERSITÄT KONSTANZ (2009)