

Date: 16-04-2025

Candidate Name: Tanmay Thakur

Title of Dissertation: Electron States Confined in Electrostatic Quantum Dots Defined within Phosphorene

Abstract (in English):

This thesis explores electrostatic quantum dots defined in phosphorene, emphasizing the unique effects of its mass anisotropy on electron behavior in confined systems. In a quantum ring defined within a phosphorene monolayer, the inherent strong anisotropy of the effective masses disrupts conventional persistent current circulation and suppresses ground-state Aharonov–Bohm oscillations in a circular geometry. However, by deforming the confinement potential into an elliptical shape, this mass anisotropy can be compensated, restoring clear oscillatory behavior and enabling ground-state parity transformations with well-defined periodicity. Both tight-binding and effective mass models reveal that at a specific ratio of the ellipse’s semi-axes, the system mimics the energy spectrum of a circular quantum ring with an isotropic effective mass, and analytical arguments show that in the narrow-ring limit, the spectrum converges to that of an ideal one-dimensional ring. When electron–electron interactions are included, the modified angular momentum operator no longer commutes with the Hamiltonian, yet properly tuned confinement still yields observable Aharonov–Bohm oscillations, suggesting a versatile framework applicable to any anisotropic material.

In electrostatically confined quantum dots, the large effective masses in phosphorene promote electron localization even in relatively small structures, facilitating the formation of Wigner molecules. Here, electron charge separation manifests distinctly, with anisotropy influencing the spatial configuration so that charge density distributions may not always reflect the symmetry of the confinement potential. We show that for circular dots, clear Wigner molecule formation occurs for two and four electrons, while three and five-electron systems do not exhibit this crystallization as readily. Furthermore, in elongated quantum dots, the formation of Wigner molecules is strongly favored when the longer axis aligns with the zigzag direction—characterized by heavier effective masses—whereas alignment along the armchair direction suppresses crystallization. Spectral features such as nearly degenerate ground states at zero magnetic field, low-field spin polarization, and distinct energy gaps serve as experimental fingerprints of Wigner molecule formation.

Under high magnetic fields, the interplay between strong electron–electron interactions and anisotropy give rise to intricate vortex structures within Wigner molecules. For isotropic effective mass, vortices typically emerge at the edges of the confined electron system and migrate inward as the magnetic field increases. In contrast, in phosphorene the vortex dynamics are highly sensitive to the orientation of the electron arrangement. When aligned along the armchair direction, vortices tend to remain off-axis, whereas alignment along the zigzag direction causes vortices to transfer to the axis at higher filling factors, often accompanied by the formation and annihilation of antivortices. These vortex patterns provide critical insight into the fractional quantum Hall regime and the nature of electron correlations in anisotropic systems.

Additionally, arrays of phosphorene quantum dots can be engineered to exhibit itinerant ferromagnetism under nearly half-filled conditions. By carefully tuning the geometry—specifically, the interdot separations along the armchair and zigzag directions—it is possible to overcome the challenges imposed by effective mass anisotropy and stabilize a fully spin-polarized ground state. The optimal array configuration can yield a significant energy gap, suggesting that the ferromagnetic state is robust against small structural imperfections. Finally, in double quantum dot systems, the combination of anisotropic effective masses and spin-orbit coupling enables efficient electrical manipulation of electron spins via electric dipole spin resonance. Simulations indicate that the appropriate detuning of the confinement potential leads to pronounced avoided crossings between singlet and triplet states, where coherent Rabi oscillations can be induced on a sub-nanosecond timescale. The results further demonstrate that device orientation plays a crucial role in determining interdot tunneling and the rates of spin transitions, thus offering a promising pathway for high-fidelity spin qubit operations in phosphorene-based quantum devices.

This thesis provides a coherent theoretical framework for understanding and engineering quantum interference, electron correlation, and spin dynamics in phosphorene nanostructures. The insights gained is beneficial to future experimental realizations and applications in quantum computing and nanoelectronics.

Abstract (in Polish):

Niniejsza rozprawa bada elektrostatyczne kropki kwantowe zdefiniowane w fosforenie, podkreślając unikalny wpływ anizotropii masy na zachowanie elektronów w układach zamkniętych. W pierścieniu kwantowym zdefiniowanym w monowarstwie fosforenu, nieodłączna silna anizotropia mas efektywnych zakłóca konwencjonalną cyrkulację prądu trwałego i tłumi oscylacje Aharonova-Bohma w stanie podstawowym w geometrii kołowej. Jednak poprzez deformację potencjału ograniczającego do kształtu eliptycznego, ta anizotropia masy może zostać skompensowana, przywracając wyraźne zachowanie oscylacyjne i umożliwiając transformacje parzystości w stanie podstawowym z dobrze zdefiniowaną okresowością. Zarówno modele ścisłego wiązania, jak i masy efektywnej ujawniają, że przy określonym stosunku półosi elipsy układ naśladuje widmo energetyczne kołowego pierścienia kwantowego z izotropową masą efektywną, a argumenty analityczne pokazują, że w granicy wąskiego pierścienia widmo zbiega się do widma idealnego jednowymiarowego pierścienia. Po uwzględnieniu oddziaływań elektron-elektron zmodyfikowany operator momentu pędu nie komutuje już z hamiltonianem, ale odpowiednio dostrojone ograniczenie nadal daje obserwowalne oscylacje Aharonova-Bohma, co sugeruje wszechstronne ramy mające zastosowanie do dowolnego materiału anizotropowego.

W elektrostatycznie zamkniętych kropkach kwantowych duże masy efektywne w fosforenie sprzyjają lokalizacji elektronów nawet w stosunkowo małych strukturach, ułatwiając tworzenie cząsteczek Wignera. W tym przypadku separacja ładunków elektronowych przejawia się wyraźnie, z anizotropią wpływającą na konfigurację przestrzenną, tak że rozkłady gęstości ładunku mogą nie zawsze odzwierciedlać symetrię potencjału ograniczającego. Pokazujemy, że w przypadku okrągłych kropek, wyraźne tworzenie cząsteczek Wignera występuje dla dwóch i czterech elektronów, podczas gdy układy trzy- i pięcioelektronowe nie wykazują tak łatwej krystalizacji. Co więcej, w wydłużonych kropkach kwantowych tworzenie cząsteczek Wignera jest silnie preferowane, gdy dłuższa oś jest wyrównana z kierunkiem zygzakowatym - charakteryzującym się cięższymi masami efektywnymi - podczas gdy wyrównanie wzdłuż kierunku ramienia tłumi krystalizację. Cechy spektralne, takie jak prawie zdegenerowane stany podstawowe w zerowym polu magnetycznym, polaryzacja spinowa w niskim polu i wyraźne luki energetyczne służą jako eksperymentalne odciski palców tworzenia cząsteczek Wignera.

W wysokich polach magnetycznych wzajemne oddziaływanie między silnymi oddziaływaniami elektron-elektron i anizotropią powoduje powstawanie skomplikowanych struktur wirowych w cząsteczkach Wignera. W przypadku izotropowej masy efektywnej, wiry zwykle pojawiają się na krawędziach ograniczonego układu elektronowego i migrują do wewnątrz wraz ze wzrostem pola magnetycznego. W przeciwieństwie do tego, w fosforenie dynamika wirów jest bardzo wrażliwa na orientację układu elektronów. W przypadku ułożenia wzdłuż kierunku armchair, wiry mają tendencję do pozostawania poza osią, podczas gdy ułożenie wzdłuż kierunku zygzakowatego powoduje przenoszenie wirów do osi przy wyższych współczynnikach wypełnienia, czemu często towarzyszy tworzenie i anihilacja antywirów. Te wzory wirów zapewniają krytyczny wgląd w ułamkowy reżim kwantowy Halla i naturę korelacji elektronowych w układach anizotropowych.

Dodatkowo, tablice fosforowych kropek kwantowych można zaprojektować tak, aby wykazywały ferromagnetyzm wędrowny w warunkach prawie połowicznego wypełnienia. Poprzez staranne dostrojenie geometrii - w szczególności odstępów między punktami wzdłuż kierunków armchair i zigzag - możliwe jest przewyciężenie wyzwań narzuconych przez efektywną anizotropię masy i ustabilizowanie w pełni spolaryzowanego spinowo stanu podstawowego. Optymalna konfiguracja matrycy może zapewnić znaczną lukę energetyczną, co sugeruje, że stan ferromagnetyczny jest odporny na małe niedoskonałości strukturalne. Wreszcie, w układach podwójnych kropek kwantowych, połączenie anizotropowych mas efektywnych i sprzężenia spin-orbita umożliwia wydajną elektryczną manipulację spinami elektronów poprzez elektryczny dipolowy rezonans spinowy. Symulacje wskazują, że odpowiednie odstrojenie potencjału ograniczającego prowadzi do wyraźnego uniknięcia przejść między stanami singletowymi i trypletowymi, w których spójne oscylacje Rabiiego mogą być indukowane w skali czasowej poniżej nanosekund. Wyniki pokazują ponadto, że orientacja urządzenia odgrywa kluczową rolę w określaniu tunelowania między punktami i szybkości przejść spinowych, oferując w ten sposób obiecującą ścieżkę dla wysoce wiernych operacji kubitów spinowych w urządzeniach kwantowych opartych na fosforenie.

Niniejsza rozprawa dostarcza spójnych ram teoretycznych dla zrozumienia i inżynierii interferencji kwantowej, korelacji elektronowej i dynamiki spinowej w nanostrukturach fosforowych. Uzyskany wgląd jest korzystny dla przyszłych realizacji eksperymentalnych i zastosowań w obliczeniach kwantowych i nanoelektronice.

Candidate Signature and Date:

16-06-2025 