

Интерфейсный магнетизм в напряженных полупроводниковых гетероконтактах с антиферромагнитным упорядочением

© В.Г. Канцер, Н.М. Малкова

Институт прикладной физики Академии наук Молдавии,
277028 Кишинев, Молдавия

(Поступила в Редакцию 30 апреля 1996 г.
В окончательной редакции 17 января 1997 г.)

Рассматриваются напряженные гетероконтакты с антиферромагнитным упорядочением, в которых исходные полупроводники имеют инверсный по отношению друг к другу зонный спектр. Показано, что появляющиеся в этих гетероконтактах интерфейсные состояния расщеплены по спину. В результате, если уровень Ферми попадает в одну из зон интерфейсных состояний, это приводит к магнитному упорядочению в плоскости интерфейса, т. е. может наблюдаться эффект интерфейсного магнетизма.

В последние годы благодаря прогрессу в полупроводниковой технологии начали изготавливаться и изучаться квантовые слоистые структуры, образованные из полупроводников с сильно отличающимися параметрами решеток. В этом случае при сравнительно небольших толщинах слоев (обычно меньше 250 \AA) возможно согласование несоответствия параметров решеток путем однородной (или с определенным градиентом) встроенной деформации слоев и получение таким образом напряженных слоистых структур с высокой степенью совершенства. В этой ситуации наряду с геометрическим (толщины слоев) и материаловедческим (вид полупроводника) факторами управления и модификации электронного спектра квантовой структуры появляется дополнительный, связанный с внутренними деформациями.

Встроенные деформации, как известно, приводят, с одной стороны, к прямому деформационному изменению электронного спектра квантовой структуры, учитываемому в рамках приближения деформационного потенциала, и, с другой стороны, к Штрак-эффекту пьезоэлектрических полей [1]. Кроме этого, в силу того, что поляризация связана с взаимным смещением анионных и катионных подрешеток полупроводника, а также с учетом того, что зонные состояния валентной зоны и зоны проводимости генерируются соответственно анионной и катионной подрешетками, через эффект поляризации появляется третий канал воздействия деформации на электронный спектр квантовой структуры. В предыдущей работе авторов [2] изучалось влияние эффекта индуцированной поляризации на приграничные электронные состояния интерфейсного типа полупроводникового гетероконтакта как с нормальным, так и с инверсным расположением зон. В структурах последнего типа и было предсказано впервые [3] возникновение универсальных электронных состояний приграничного типа, и в силу своей специфичности такие гетероконтакты были названы инверсными. При этом, как было показано в работах [4,5], принципиальной особенностью этих интерфейсных состояний, выделяющей их в отдельный класс, является то, что они могут образовываться на различных типах неоднородностей электронной системы, таких как неоднородность состава (реализуемая как гетеропереход), неоднородность вектора антиферромагнитного

упорядочения (антиферромагнитная доменная стенка) или неоднородность вектора поляризации (сегнетоэлектрическая доменная стенка). Неоднородности последних двух типов имеют векторный характер, и их воздействие на электронное строение полупроводниковых структур зависит не только от амплитуд соответствующих полей, но и от их пространственной ориентации. В результате электронные состояния структур с различной кристаллографической ориентацией могут различаться кардинальным образом. Кроме того, принимая во внимание то, что векторные неоднородности магнитного вида ведут к нарушению симметрии относительно обращения времени, мы имеем возможность искусственно создавать неоднородные системы с нарушением фундаментальных свойств симметрии. Таким образом, для квантовых структур со встроенными векторными неоднородными полями, нарушающими пространственную и временную инверсную симметрию, следует ожидать разного рода новых эффектов, один из которых — интерфейсный магнетизм — и рассматривается в данной работе.

Конкретными примерами упомянутых инверсных структур являются гетероструктуры на базе узкощелевых полупроводников типа IV–VI или II–VI. При легировании переходными или редкоземельными металлами эти полупроводники становятся полумагнитными, и при низких температурах они могут переходить в антиферромагнитное или ферромагнитное состояние. В настоящей работе ставится задача изучения интерфейсных состояний в напряженном инверсном полупроводниковом гетероконтакте с антиферромагнитным упорядочением. Интересно отметить следующую аналогию. В системах с электрон-дырочным спариванием сосуществование волны спиновой плотности, соизмеримой с волной зарядовой плотности, приводит к спиновому расщеплению спектра и в условиях конечного легирования к электронному упорядочению ферромагнитного типа [6]. Учитывая теперь то, что волна зарядовой плотности может индуцироваться структурными искажениями решетки, вызывающими поляризацию, а волна спиновой плотности — антиферромагнитным упорядочением, можно утверждать, что напряженная структура с антиферромагнитным упорядочением подобна системе с экситонным ферромагнетизмом [6].

1. Модель энергетического спектра исходных полупроводников

Поставленная выше задача решается на базе симметричной двухзонной $\mathbf{k}\hat{\mathbf{p}}$ -модели, адекватно описывающей зонный спектр узкощелевых полупроводников IV–VI. В случае зеркально-симметричных зон энергетический спектр напряженных полупроводников при наличии поляризации и антиферромагнитного упорядочения вдоль тригональной оси [111], выбранной в качестве оси z , описывается модифицированным уравнением Дирака [3]

$$\hat{H}_0 = \begin{pmatrix} \Delta & \boldsymbol{\sigma}\hat{\mathbf{p}} - i(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{E} + L) \\ \boldsymbol{\sigma}\hat{\mathbf{p}} + i(\boldsymbol{\sigma}\mathbf{E} + L) & -\Delta \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где верхний блок описывает спинорное состояние φ зоны проводимости, а нижний блок — спинор χ валентной зоны. Здесь $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ — вектор спина с компонентами матриц Паули, $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar(v_\perp \nabla_x, v_\perp \nabla_y, v_\parallel \nabla_z)$, $v_{\perp, \parallel}$ — скорость Ферми, $\Delta = E_g/2$, E_g — энергетическая щель. Вектор \mathbf{E} описывает эффект поляризации, индуцированной внутренними напряжениями структуры [2]. Отметим, что прямой эффект встроенных деформаций, учитываемый в рамках приближения деформационного потенциала, вносит вклад в диагональные блоки гамильтониана (1) [7] (т.е. он может быть учтен соответствующей перенормировкой параметра Δ), что приводит к тривиальному смещению уровней интерфейсных состояний. В настоящей работе мы считаем, что вектор \mathbf{E} направлен вдоль оси z , поскольку для рассматриваемых структур поляризация поля максимальна именно вдоль тригональной оси. Очевидно, поляризация кристаллической решетки в свою очередь вызывает появление электрического поля. Однако в силу специфичности свойств рассматриваемых материалов (в частности, больших диэлектрических проницаемостей) оно очень сильно заэкранировано и поэтому на первом этапе нами не учитывается.

Антиферромагнитное упорядочение магнитных примесей вдоль оси z задает функцию спиновой плотности, которая в предположении о том, что магнитные примеси являются примесями внедрения, т.е. располагаются в междоузлиях, является нечетной. В результате обменное взаимодействие между магнитными примесями и зонными электронами, описываемыми базисными функциями из работы [8], приводит к появлению в гамильтониане (1) недиагональных блоков с матричным элементом L . Предположение о том, что магнитные примеси в рассматриваемых полупроводниковых структурах являются примесями внедрения, требует обсуждения. По имеющимся в настоящее время данным при низких уровнях легирования магнитные примеси в полумагнитных полупроводниках типа IV–VI, рассматриваемых в настоящей работе в качестве модельных материалов, являются примесями замещения. Однако межузельное положение магнитных примесей не является невозможным и реализуется в данных полупроводниковых структурах при

высоких уровнях легирования (>4 at.%), когда полупроводниковый материал можно рассматривать как твердый раствор [9]. Заметим, что в рамках использованного в работе подхода случай антиферромагнитного упорядочения с четной функцией спиновой плотности, соответствующей магнитным примесям замещения, приводит к возникновению диагональных магнитных блоков в гамильтониане (1) [10], дающих тривиальные результаты для изучаемых в настоящей работе эффектов. Полный гамильтониан (1) по структуре аналогичен гамильтониану, описывающему энергетический спектр экситонного ферромагнетика в приближении среднего поля [6], что вполне закономерно в русле отмеченной выше аналогии между этими двумя задачами.

При помощи преобразования

$$\hat{U} = \begin{pmatrix} i\sigma_z & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2)$$

гамильтониан (1) приводится к виду

$$\hat{H} = \hat{U}\hat{H}_0\hat{U}^{-1} = \begin{pmatrix} \Delta & i\hat{p}_z + \hat{W} + E \\ -i\hat{p}_z + \hat{W} + E & -\Delta \end{pmatrix}, \quad (3)$$

где оператор $\hat{W} = \boldsymbol{\sigma}[\hat{\mathbf{p}}\mathbf{n}] + \sigma_z L$, \mathbf{n} — единичный вектор вдоль оси z .

Поскольку изучаемые в настоящей работе интерфейсные состояния по своей природе таммовского типа и поэтому определяются электронными состояниями исходных полупроводников, сначала рассмотрим объемный электронный спектр напряженного полупроводника при наличии поляризации и антиферромагнитного упорядочения вдоль оси z . В этом случае энергетический спектр состоит из четырех расщепленных по спину ветвей

$$\varepsilon_{1,2}^\pm = \sqrt{(E + W_\pm)^2 + \Delta^2 + p_z^2}. \quad (4)$$

Здесь $W_\pm = \pm\sqrt{L^2 + p_\perp^2}$ — собственные значения оператора \hat{W} , которым соответствуют собственные векторы

$$\varphi^\pm = \begin{pmatrix} 1 \\ (p_y - ip_x)/(L + W_\pm) \end{pmatrix} \varphi_0^\pm, \quad (5)$$

где φ_0^\pm — нормирующий множитель, p_\perp — длина вектора $\mathbf{p}_\perp = (p_x, p_y, 0)$. Ветви $\varepsilon_{1,2}^+$ и $\varepsilon_{1,2}^-$ описывают соответственно две расщепленные по спину зоны проводимости и две валентные зоны. Учитывая выражение для базисных волновых функций, легко находим средний спин для каждого из состояний $\varepsilon_{1,2}^\pm$ (4)

$$\mathbf{S}_{1,2}^\pm = \frac{4|\varepsilon_{1,2}^\pm|}{|E + W_\pm - \varepsilon_{1,2}^\pm|} \frac{1}{L + W_\pm} (p_y, -p_x, L). \quad (6)$$

Таким образом, при наличии индуцированной поляризации и антиферромагнитного упорядочения снимается крамерово спиновое вырождение объемных зонных состояний, и каждая из ветвей зоны проводимости $\varepsilon_{1,2}^+$ или

валентной зоны $\varepsilon_{1,2}^-$ характеризуется противоположной ориентацией среднего спина. При этом среднее значение проекции спина электронов зонных состояний направлено вдоль вектора

$$\mathbf{I} = L\mathbf{n} + \mathbf{n} \times \mathbf{p}_\perp. \quad (7)$$

2. Интерфейсные состояния напряженного инверсного контакта

Рассмотрим теперь случай неоднородной полупроводниковой структуры в виде несимметричного инверсного контакта с ориентацией вдоль оси [111], когда кроме координатной зависимости щелевого параметра Δ имеется также координатная зависимость индуцированной поляризации E при постоянных для обоих контактирующих полупроводников параметре антиферромагнитного упорядочения L и остальных зонных параметрах. Для несимметричного инверсного контакта середины запрещенных зон исходных полупроводников не совпадают, поэтому в гамильтониан необходимо ввести зависящую от z разницу работ выхода V . При этом для того, чтобы провести аналитический расчет до конца, будем предполагать, что координатная зависимость параметров Δ , E и V определяется одной функцией $f(z)$ так, что

$$\Delta(z) = \Delta_0 f(z), \quad E(z) = E_0 f(z), \quad V(z) = V_0 f(z), \quad (8)$$

где Δ_0 , E_0 , V_0 — постоянные. Очевидно, в инверсном контакте знаки асимптотик $f(z \rightarrow \pm\infty)$ в Δ и V противоположны. Что касается поляризации, то такой вариант возможен, но в реальной физической ситуации при противоположных знаках асимптотики функции $f(z)$ могут отличаться по амплитуде. Однако в данной работе для упрощения выкладок мы выбираем именно его.

Тогда гамильтониан задачи при помощи унитарного поворота \hat{V} на угол θ , определяемый из уравнения

$$\Delta_0 \cos 2\theta - E_0 \sin 2\theta + V_0 = 0, \quad (9)$$

приводит к виду

$$\hat{H} = \hat{V}^{-1} \hat{H} \hat{V} = \begin{pmatrix} -W_\pm \sin 2\theta & -\sqrt{E^2 + \Delta^2 - V^2} + W_\pm \cos 2\theta + i\hat{p}_z \\ -\sqrt{E^2 + \Delta^2 - V^2} + W_\pm \cos 2\theta - i\hat{p}_z & 2V + W_\pm \sin 2\theta \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Отсюда следует, что уравнение Шредингера

$$(\hat{H} - \varepsilon) \begin{pmatrix} \tilde{\varphi}^\pm \\ \tilde{\chi}^\pm \end{pmatrix} = 0 \quad (11)$$

имеет решение при $\tilde{\chi}^\pm = 0$. Это так называемая "нулевая мода", получаемая методом суперпотенциала. При асимптотике $f(+\infty) > 0$ и $f(-\infty) < 0$ получаем следующее решение для спектра интерфейсных состояний:

$$\varepsilon_i^\pm = \mp \frac{E_0 V_0 - \Delta_0 \sqrt{E_0^2 + \Delta_0^2 - V_0^2}}{\Delta_0^2 + E_0^2} \sqrt{p_\perp^2 + L^2}. \quad (12)$$

При этом огибающая волновой функции $\tilde{\varphi}^\pm$ удовлетворяет уравнению

$$(i\hat{p}_z + W^\pm(z))\tilde{\varphi}^\pm = 0, \quad (13)$$

где

$$W^\pm(z) = \sqrt{E_0^2 + \Delta_0^2 - V_0^2} \times \left(f(z) \pm \sqrt{p_\perp^2 + L^2} \frac{\Delta_0 V_0 + E_0 \sqrt{E_0^2 + \Delta_0^2 - V_0^2}}{(\Delta_0^2 + E_0^2) \sqrt{E_0^2 + \Delta_0^2 - V_0^2}} \right).$$

Эта функция играет ту же роль, что суперпотенциал в методе суперсимметричной квантовой механики [2,11]. Из (15) видно, что состояния ε_i^\pm интерфейсного типа, так как $\tilde{\varphi}^\pm$ локализованы на интерфейсной границе. При выбранной асимптотике функции $f(z)$ волновые функции $\tilde{\varphi}^\pm$ нормируются при выполнении условия

$$\sqrt{p_\perp^2 + L^2} < \frac{(\Delta_0^2 + E_0^2) \sqrt{E_0^2 + \Delta_0^2 - V_0^2}}{(\Delta_0 V_0 + E_0) \sqrt{E_0^2 + \Delta_0^2 - V_0^2}}. \quad (14)$$

Таким образом, интерфейсные состояния (12) ограничены как в области энергий, так и в области импульсов.

Решение, соответствующее противоположной асимптотике функций $f(z)$, получается из (12), (13) заменой $\Delta_0 \rightarrow -\Delta_0$ и $p_z \rightarrow -p_z$.

3. Анализ интерфейсных состояний и эффект интерфейсного магнетизма

Сравнивая полученные решения (12), (13) с интерфейсными состояниями напряженного гетероперехода без антиферромагнитного упорядочения [2], видим, что в рассматриваемом случае спектр интерфейсных состояний нелинеен по p_\perp . Кроме того, в отличие от интерфейсных состояний, возникающих в простом инверсном контакте [3] или в объемном полупроводнике с антиферромагнитной доменной стенкой [11], в случае напряженного инверсного контакта с антиферромагнитным упорядочением имеется щель между "электронными" и "дырочными" ветвями спектра, которая определяется параметром антиферромагнитного упорядочения L .

Каждое интерфейсное состояние, получаемое из решения уравнения (13), не вырождено по спину, причем для среднего спина легко находим

$$\langle \Psi^\pm | \Sigma | \Psi^\pm \rangle = C_{\text{exp}} \left(-\frac{2}{\hbar v_\parallel} \int W^\pm(z) dz \right) \times \frac{2}{L \pm \sqrt{p_\perp^2 + L^2}} (p_y, -p_x, L), \quad (15)$$

где C — постоянная. После усреднения по импульсу p_{\perp} для принятой здесь симметричной модели спектра получаем

$$\langle \mathbf{S}^{\pm} \rangle \sim \pm \left(\sqrt{L^2 + p_{\perp \max}^2} - L \right) (0, 0, L), \quad (16)$$

где $p_{\perp \max}$ определяется условием (14). Таким образом, средние спины состояний Ψ^+ и Ψ^- направлены противоположно вдоль оси z .

Как следует из (12), когда $f(+\infty) > 0, f(-\infty) < 0$, при соотношении параметров $\Delta_0^2 > V_0^2$ энергетический уровень ε_i^+ расположен выше по энергии, чем ε_i^- , тогда как при $V_0^2 > \Delta_0^2$ они меняются местами. И, таким образом, выше оказывается состояние со спином вниз. При противоположном выборе асимптотик, когда $f(+\infty) < 0, f(-\infty) > 0$, состояние ε_i^- со спином вниз выше состояния ε_i^+ со спином вверх (рис. 1, 2).

Из сравнения выражений для энергетических зон однородных полупроводников (4) и энергетического положения интерфейсных состояний (12) видно, что уровни энергии интерфейсных состояний располагаются ближе к середине запрещенной зоны исходных полупроводников. Следовательно, если в рассматриваемых инверсных контактах уровень Ферми, например, при помощи легирования попадает в одну из зон интерфейсных состояний, то это приводит к появлению магнитного упорядочения в плоскости интерфейса. При этом, как видно из (15), магнитный момент экспоненциально затухает при удалении от плоскости контакта.

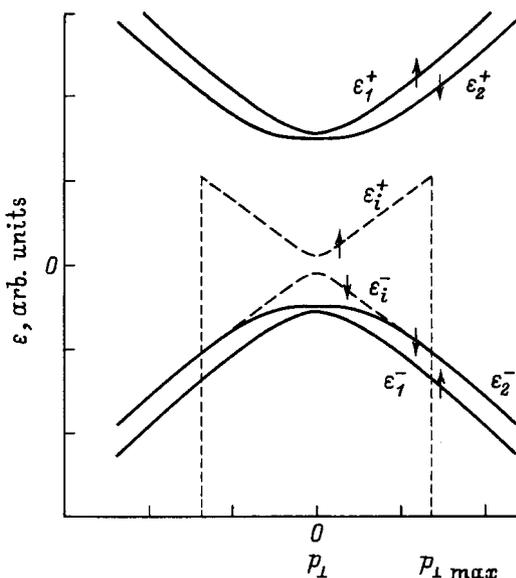


Рис. 1. Качественная картина спектра интерфейсных состояний в напряженном инверсном контакте с антиферромагнитным упорядочением для асимптотик $f(+\infty) > 0, f(-\infty) < 0$ ($\Delta_0^2 > V_0^2$). Сплошные линии показывают энергетические ветви исходных полупроводников, штриховые — интерфейсные состояния. Стрелки указывают направление спина.

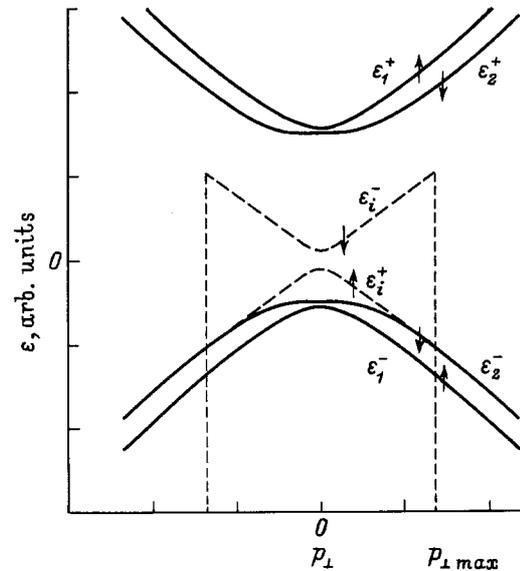


Рис. 2. То же, что и на рис. 1, для асимптотик $f(+\infty) < 0, f(-\infty) > 0$.

Исследованный в настоящей работе эффект интерфейсного магнетизма может наблюдаться и в нормальном полупроводниковом гетероконтакте, когда ширины запрещенных зон контактирующих полупроводников имеют одинаковые знаки. Однако в этом случае, как было показано в [2,12], интерфейсные состояния образуются на фоне объемных состояний исходных полупроводников в области, ограниченной по p_{\perp} . Поэтому для наблюдения эффекта интерфейсного магнетизма в нормальном полупроводниковом гетероконтакте необходимы более строгие условия.

Список литературы

- [1] D.L. Smith, C. Mailhot. Rev. Mod. Phys. **62**, 1, 173 (1990).
- [2] В.Г. Канцер, Н.М. Малкова. Письма в ЖЭТФ **54**, 7, 384 (1991).
- [3] Б.А. Волков, О.А. Панкратов. Письма в ЖЭТФ **42**, 4, 178 (1985).
- [4] О.А. Панкратов. Phys. Lett. **A121**, 7, 360 (1987).
- [5] Б.А. Волков, Б.Г. Идлис, М.Ш. Усманов. УФН **165**, 7, 799 (1995).
- [6] Б.А. Волков. Тр. ФИАН **104**, 3 (1978).
- [7] M. Kriechbaum, P. Kochevar, H. Pascher, G. Bauer. IEEE J. Quant. Electron. **24**, 8, 1727 (1988).
- [8] D.L. Mitchell, R.F. Wallis. Phys. Rev. **151**, 2, 581 (1966).
- [9] A. Mauger, M. Escorne. Phys. Rev. **B35**, 4, 1902 (1987).
- [10] H. Pascher, P. Rothlein, M. Kriechbaum, N. Frank, G. Bauer. Superlatt. Microstruct. **8**, 1, 69 (1990).
- [11] О.А. Панкратов, С.А. Пакхомов, В.А. Волков. Solid State Commun. **61**, 2, 93 (1987).
- [12] D. Agassi, V. Korenman. Phys. Rev. **B37**, 17, 10095 (1988).