

Электрон-электронное и спин-орбитальное взаимодействие в гетероструктурах InAs/AlSb с двумерным электронным газом

© В.И. Гавриленко, С.С. Криштопенко[¶], М. Goiran*

Институт физики микроструктур Российской академии наук, 603950 Нижний Новгород, Россия

* Laboratoire National des Champs Magnétiques Intenses, 31400 Toulouse, France

(Получена 27 апреля 2010 г. Принята к печати 18 июня 2010 г.)

Теоретически изучено влияние электрон-электронного взаимодействия на спектр двумерных электронных состояний в гетероструктурах InAs/AlSb (001) с покрывающим слоем GaSb с одной заполненной подзоной размерного квантования. Выполнены расчеты энергетического спектра двумерных электронов в приближении Хартри и Хартри–Фока. Показано, что обменное взаимодействие, приводя к уменьшению энергии электронов в подзонах, увеличивает расстояние между подзонами и величину спин-орбитального расщепления спектра во всем диапазоне значений концентрации электронов, при которых заполнена только нижняя подзона размерного квантования. Продемонстрирована нелинейная зависимость константы расщепления Рашбы при фермиевском волновом векторе от концентрации двумерных электронов.

1. Введение

В последние годы во всем мире наблюдается значительный интерес к полупроводниковым структурам, характеризующимся не только высокой подвижностью носителей заряда, но и большим спиновым расщеплением в энергетическом спектре. Это в первую очередь обусловлено бурным ростом числа исследований в области спинтроники, инициированным идеей создания спинового транзистора [1]. Гетероструктуры на основе узкозонных полупроводников, таких как InAs, InSb [2–11] и бесщелевых полупроводников HgSe, HgTe [12–14], в которых эффекты спин-орбитального взаимодействия выражены сильнее, чем в других полупроводниковых гетероструктурах, являются наиболее перспективными для таких приложений.

Основное внимание исследователей привлекает спиновое расщепление энергетического спектра носителей в двумерных (2D) полупроводниковых системах в отсутствие магнитного поля. Данное расщепление электронных состояний вблизи дна зоны проводимости в 2D полупроводниковых структурах либо линейно, либо кубично по квазиимпульсу (в зависимости от совместного вклада $|S\rangle$ - и $|P\rangle$ -состояний объемных материалов в формирование нижней подзоны размерного квантования гетероструктуры). Спиновое расщепление электронных состояний при определенных условиях может проявляться в виде биений осцилляций Шубникова–де-Гааза [3–6,9,12,13], расщеплении линии циклотронного резонанса [8,14], а также определяет появление особенностей в спектрах спинового резонанса [10] и рамановского рассеяния [15].

Гетероструктуры InAs/AlSb (рис. 1) характеризуются малой эффективной массой электронов ($0.03m_0$), большим значением g -фактора и высокой подвижностью электронов, достигающей $3 \cdot 10^4 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$ при $T = 300 \text{ К}$

и $9 \cdot 10^5 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$ при $T = 4.2 \text{ К}$ [16], что позволяет использовать их не только для создания традиционных быстродействующих электронных приборов, но и для различных приборов спинтроники. Технология роста исследуемых гетероструктур InAs/AlSb описана в [17]. В данных гетероструктурах квантовая яма (КЯ) для электронов оказывается очень глубокой (более 2 эВ для электронов Г-долины) — рис. 1. Хорошо известно, что даже в номинально нелегированных структурах InAs/AlSb присутствует 2D электронный газ с концентрацией порядка 10^{12} см^{-2} [18]. В качестве возможных „поставщиков“ электронов в квантовые ямы InAs рассматриваются глубокие доноры, связанные с дефектами в AlSb, доноры на гетерограницах InAs/AlSb и поверхностные доноры в покрывающем слое GaSb [19–23], обычно выращиваемом поверх барьера AlSb для предот-

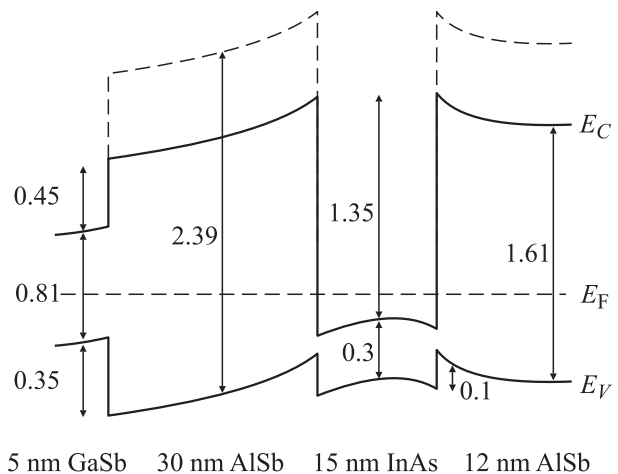


Рис. 1. Зонная схема номинально нелегированной гетероструктуры InAs/AlSb. Пунктирной линией показано положение Г-долины в зоне проводимости AlSb. Стрелками показаны энергии (эВ).

[¶] E-mail: ds_a-teens@mail.ru

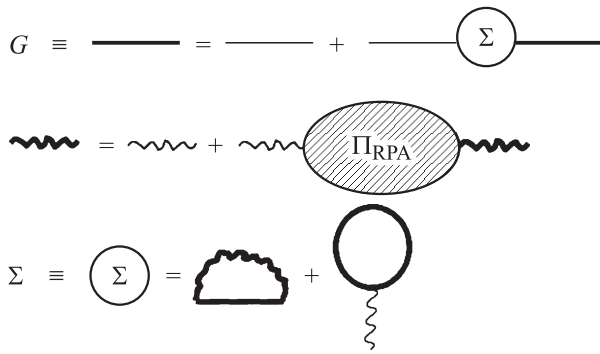


Рис. 2. Диаграммное представление выполненных расчетов. Прямые жирные линии соответствуют функциям Грина для взаимодействующих частиц, прямые тонкие линии — функциям Грина невзаимодействующих электронов. Кулоновское взаимодействие между электронами изображено волнистыми линиями (экранированное — толстыми, неэкранированное — тонкими). В собственно-энергетической части Σ учитывается обменная и хартриевская диаграммы.

вращения его окисления на воздухе. В таких структурах экспериментально наблюдаются эффекты спин-орбитального расщепления спектра состояний в зоне проводимости в нулевом магнитном поле [24], вызванные отсутствием центра пространственной симметрии и обусловленные как структурной асимметрией (SIA — расщепление Рашбы [25]), так и отсутствием центра инверсии в элементарной ячейке (BIA — расщепление Дрессельхауз [26]). Электрическое поле пространственно разделенных поверхностных доноров в покрывающем слое GaSb и 2D электронов искажает профиль КЯ, что в свою очередь через спин-орбитальное взаимодействие приводит к расщеплению спектра 2D электронов в КЯ AlSb/InAs/AlSb даже в отсутствие магнитного поля [25].

Одной из особенностей рассматриваемой гетеросистемы является биполярность остаточной фотопроводимости (ОФП), наблюдаемой при низких температурах [20–23, 27] и связанной с перезарядкой поверхностных доноров в покрывающем слое GaSb. При воздействии на гетероструктуру инфракрасным (ИК) излучением наблюдается положительная остаточная фотопроводимость, при освещении в видимом диапазоне наблюдается отрицательная остаточная фотопроводимость. Используя явление ОФП, можно обратимым образом в несколько раз изменять концентрацию 2D электронов в КЯ AlSb/InAs/AlSb и соответственно встроенное электрическое поле и заселенность спиновых подзон. Это позволяет не только управлять эффектами спин-орбитального взаимодействия, но и контролировать проявление эффектов коллективного взаимодействия между электронами (в частности, управлять обменным усилением g -фактора) [2], что открывает дополнительные возможности для спиновой инженерии.

В данной работе исследуется влияние электрон-электронного взаимодействия на спектр 2D электронных

состояний в нулевом магнитном поле в гетероструктурах InAs/AlSb с одной заполненной подзоной размерного квантования (для типичной ширины квантовой ямы InAs 15 нм заполнение второй подзоны размерного квантования начинается при концентрациях электронов свыше $1.5 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$). Цель работы — расчет величины спин-орбитального расщепления энергетического спектра 2D электронов и расстояния между подзонами размерного квантования в КЯ AlSb/InAs/AlSb во всем диапазоне концентраций 2D электронов, при которых заполнена только нижняя подзона размерного квантования. Расчет основан на решении системы нелинейных самосогласованных уравнений Хартри–Фока с учетом эффектов экранировки (рис. 2) для описания одноэлектронных состояний в квантовой яме. В качестве одноэлектронного оператора кинетической энергии использовался восьмизонный гамильтониан Кейна [28,29] для огибающих волновых функций. Это позволяет корректно учитывать влияние непараболичности, деформации и спин-орбитального взаимодействия на энергетический спектр электронных состояний в гетероструктурах, выращенных на основе узкозонных полупроводников, таких как InAs. Постоянная решетки InAs в плоскости КЯ полагалась такой же, как и в AlSb.

Для нахождения кулоновской функции Грина с учетом сил изображения и экранировки, описывающей взаимодействие между двумя точечными зарядами (жирная волнистая линия на рис. 2), решалась задача о движении электрона в плоскостной среде с пространственной дисперсией [30]. Пространственная дисперсия, описываемая поляризационным оператором Π_{RPA} , рассчитывалась в рамках приближения хаотических фаз.

При расчете энергетического спектра 2D состояний в КЯ AlSb/InAs/AlSb, выращенной в направлении [001], в качестве возможных „поставщиков“ электронов в квантовую яму рассматривались только поверхностные доноры в покрывающем слое GaSb. Исследования ОФП в номинально нелегированных гетероструктурах с двойными квантовыми ямами AlSb/InAs/AlSb/InAs/AlSb и количественные расчеты концентраций ионизированных доноров в барьерах AlSb и покрывающем слое GaSb [27] показывают, что основными „поставщиками“ электронов в двойную КЯ являются именно доноры в покрывающем слое GaSb. Поскольку механизм ОФП в нелегированных гетероструктурах InAs/AlSb является общим для образцов с двойными [27] и одиночными КЯ [23], данное приближение является оправданным для расчета энергетического спектра 2D состояний в одиночных квантовых ямах AlSb/InAs/AlSb.

2. Приближение Хартри

Для исследования влияния нелокальной части электрон-электронного взаимодействия — обменной диаграммы в собственно энергетической части (рис. 2) на энергетический спектр 2D электронов в КЯ AlSb/InAs/AlSb,

выращенной в направлении [001], необходимо сначала найти спектр 2D состояний в отсутствие обменного взаимодействия (приближение Хартри). В данном приближении в одноэлектронном гамильтониане учитывается только электрическое поле пространственно разделенных 2D электронов и ионизированных доноров в покрывающем слое, а в собственно энергетической части только локальная часть электрон-электронного взаимодействия (вторая диаграмма в собственно энергетической части Σ на рис. 2). Такой подход эквивалентен самосогласованному решению системы уравнений Шредингера и Пуассона:

$$H_{(1e)}(\mathbf{r}, z)\Psi_{N,\mathbf{k}}(\mathbf{r}, z) = E_N(\mathbf{k})\Psi_{N,\mathbf{k}}(\mathbf{r}, z),$$

$$\nabla(\varepsilon\nabla\varphi_{e-e}) = -4\pi e \sum_{N'} \int_{|\mathbf{k}| < k_F^{N'}} \frac{d^2\mathbf{k}}{(2\pi)^2} \Psi_{N',\mathbf{k}}^+ \Psi_{N',\mathbf{k}}, \quad (1)$$

где ε — диэлектрическая проницаемость в каждом слое гетероструктуры, e — заряд электрона, $\Psi_{N,\mathbf{k}}(\mathbf{r}, z)$ — многокомпонентная огибающая волновая функция одночастичного состояния и $E_N(\mathbf{k})$ — соответствующее значение электронного состояния, характеризующегося мультииндексом N (номером подзоны размерного квантования n и квантовым числом, нумерующим спиновые подзоны) и волновым вектором \mathbf{k} в плоскости гетероструктуры. Знак „+“ означает эрмитово сопряжение. Заметим, что при расчете самосогласованного поля φ_{e-e} (слагаемого Хартри) учитывать экранирование кулоновского взаимодействия не следует, поскольку именно этот член в первую очередь и приводит к экранировке [31]. Одноэлектронный гамильтониан $H_{(1e)}$ в (1) имеет следующий вид:

$$H_{(1e)} = H_{8 \times 8}^{\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}} - E_{\text{Donors}} \cdot z + e\varphi_{e-e}. \quad (2)$$

Ось z , направленная по нормали к плоскости гетероструктуры, соответствует кристаллографическому направлению (001), а оси x и y — направлениям (100) и (010) соответственно.

Первое слагаемое в одноэлектронном гамильтониане (2) соответствует гамильтониану Кейна ($8 \times 8 \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$) [28,29] (в отсутствие внешних электрических полей), выбранному в качестве одноэлектронного оператора кинетической энергии. Второе слагаемое описывает электрическое поле поверхностных доноров в покрывающем слое GaSb. Третье слагаемое в гамильтониане (2) отражает тот факт, что выделенный электрон подвержен влиянию электрических полей всех других электронов, рассматривающихся как непрерывное распределение отрицательного заряда с плотностью, определяемой одноэлектронными волновыми функциями заполненных состояний (локальная часть электрон-электронного взаимодействия). В выражении для решения уравнения Пуассона системы (1) присутствует суммирование по всем заполненным подзонам размерного квантования и по волновому вектору в каждой заполненной подзоне.

Гамильтониан Кейна $H_{8 \times 8}^{\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}}$ строится сразу для зоны проводимости и сложной валентной зоны, а взаимодействие с другими более удаленными зонами учитывается по теории возмущений [29]. Выбирая базисные блоховские функции Γ -точки зоны Брюллиена в виде

$$S\alpha, X\alpha, Y\alpha, Z\alpha, S\beta, X\beta, Y\beta, Z\beta,$$

$8 \times 8 \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ гамильтониан с учетом эффектов деформации, возникающих из-за различия постоянных решеток AlSb и InAs, в отсутствие слагаемых в валентной зоне, пропорциональных квадрату волнового вектора дырок, и слагаемых, описывающих спиновое расщепление зон, появляющихся из-за отсутствия центра инверсии в элементарной ячейке в объемных материалах [26,32] и наличия интерфейсов с низкой симметрией, можно записать как [30]:

$$H_{8 \times 8}^{\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}} = \begin{pmatrix} H_4 & 0 \\ 0 & H_4 \end{pmatrix} + H_{SO} + H_\varepsilon. \quad (3)$$

Блок H_4 записывается в виде

$$H_4 = \begin{pmatrix} H_{cc} & H_{cv} \\ H_{vc} & H_{vv} \end{pmatrix},$$

где

$$H_{cc} = E_C,$$

$$H_{cv} = H_{vc}^+ = (iPk_x \quad iPk_y \quad i \cdot \text{Herm}(P; k_z)), \quad (4)$$

и

$$H_{vv} = \begin{pmatrix} H_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & H_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & H_{zz} \end{pmatrix},$$

$$H_{xx} = H_{yy} = H_{zz} = E_V - \frac{\Delta}{3}, \quad (5)$$

где E_C , E_V , Δ — положение дна зоны проводимости, потолка валентной зоны и величина спин-орбитального расщепления в отсутствие напряжения, P — межзонный матричный элемент импульса, определяемый через эффективную массу m_C на дне зоны проводимости и ширину запрещенной зоны E_g :

$$P^2 = \frac{3\hbar^2}{2m_C} \frac{E_g(E_g + \Delta)}{3E_g + 2\Delta}.$$

Выражение для операторов H_{SO} и H_ε можно найти в [27]. Поскольку в гетероструктуре E_C , E_V , Δ , P являются функциями от z и гамильтониан (3) в присутствии гетерограниц содержит неэрмитовы члены Pk_z , то для эрмитовости гамильтониана (3) (сохранения плотности тока вероятности через границу) необходимо сделать эрмитовым произведение:

$$P(z)k_z \rightarrow \text{Herm}(P; k_z). \quad (6)$$

Наличие в системе пространственно асимметричного поля, которое искажает профиль КЯ, приводит к тому, что направления вдоль и против оси роста структуры

становятся неэквивалентными. В отсутствие центра пространственной инверсии, вызванным несимметричным электрическим полем (структурно-инверсионная асимметрия, SIA), спин-орбитальное взаимодействие снимает вырождение по спину в энергетическом спектре электронных состояний (расщепление Рашбы) [25].

Считая энергии возбуждения электронов малыми по сравнению с шириной запрещенной зоны, систему уравнений (1) с многозонным гамильтонианом (2) можно свести к „однозонному“ уравнению с гамильтонианом $H_{2 \times 2}^{k \cdot p}$, справедливому вблизи дна зоны проводимости, с правильным порядком некоммутирующих операторов в операторе кинетической энергии. Пренебрегая влиянием деформации на энергетический спектр 2D электронов и учитывая $k \cdot p$ взаимодействие валентной зоны и зоны проводимости с точностью до 2-го порядка теории возмущений, получаем, что

$$H_{2 \times 2}^{k \cdot p} = E_C(z) + T + H_1^{SIA} + H_2^{SIA} - E_{\text{Donors}} \cdot z + e\varphi_{e-e}, \quad (7)$$

где

$$T = \text{Herm}(P; k_z) \frac{\hbar^2}{2P^2 m_C} \text{Herm}(P; k_z) + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_C} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_C},$$

$$\begin{aligned} H_1^{SIA} &= (\text{Herm}(P; k_z) \cdot \Gamma_1(z) \\ &\quad - \Gamma_1(z) \cdot \text{Herm}(P; k_z)) \begin{pmatrix} 0 & -k_x + ik_y \\ k_x + ik_y & 0 \end{pmatrix}, \\ H_2^{SIA} &= (\text{Herm}(P; k_z) \cdot \Gamma_2(z) \\ &\quad - \Gamma_2(z) \cdot \text{Herm}(P; k_z)) \begin{pmatrix} 0 & -k_x + ik_y \\ k_x + ik_y & 0 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (8)$$

и

$$\begin{aligned} \Gamma_1(z) &= \frac{P}{3} \frac{\Delta}{E_g(E_g + \Delta)}, \\ \Gamma_2(z) &= \frac{P}{3} \frac{\Delta(2E_g + \Delta)}{E_g^2(E_g + \Delta)^2} (e\varphi_{e-e} - E_{\text{Donors}} \cdot z). \end{aligned} \quad (9)$$

Недиагональные слагаемые H_1^{SIA} и H_2^{SIA} в (8) описывают спин-орбитальное расщепление Рашбы, которое будет линейно по волновому вектору вблизи дна зоны проводимости. Обычно при численных расчетах межзонный матричный элемент импульса P для простоты полагают постоянным для всех материалов, образующих гетероструктуру, и в этом случае выражение для гамильтониана (8) совпадает с полученным в работе [33].

В общем случае при любых значениях энергии величина спин-орбитального расщепления спектра 2D электронов определяется не только электрическим полем поверхностных доноров в покрывающем слое GaSb и параметрами структуры, но и видом граничных условий для огибающих волновых функций и пространственным распределением самосогласованного поля φ_{e-e} .

Поскольку точное выражение для эрмитовой формы (6) неизвестно, для расчетов электронного спектра

мы ограничимся использованием эрмитовой формы произведения Pk_z в виде антикоммутатора¹:

$$\text{Herm}(P; k_z) = \frac{1}{2} (k_z P + P k_z). \quad (10)$$

Граничные условия для огибающей волновой функции могут быть получены интегрированием уравнения Шредингера с гамильтонианом (2) по малой окрестности гетероперехода. Для нахождения энергии связанных состояний в КЯ AlSb/InAs/AlSb использовался метод матрицы рассеяния [34]. Для численного решения системы нелинейных уравнений (1) использовался метод последовательных приближений (метод итераций). В качестве огибающих волновых функций нулевого приближения выбирались состояния в квантовой яме, помещенной в однородное поле поверхностных доноров покрывающего слоя GaSb. Для решения уравнения Пуассона на m -й итерации использовались волновые функции, найденные на $(m-1)$ -й итерации. При расчетах энергетического спектра в гетероструктуре InAs/AlSb с 2D электронным газом использовались значения параметров, представленные в работе [27].

3. Приближение Хартри–Фока

В приближении Хартри–Фока, кроме локальной части электрон-электронного взаимодействия, в собственной энергетической части учитывается слагаемое, описываемое как обменное взаимодействие между электронами (первая диаграмма в собственной энергетической части Σ на рис. 2). Такой подход эквивалентен добавлению в уравнение Шредингера системы (1) нелокального „обменного потенциала“ $V(\mathbf{r}, \mathbf{r}', z, z')$:

$$\begin{aligned} & (H_{8 \times 8}^{k \cdot p} - E_{\text{Donors}} \cdot z + e\varphi_{e-e}) \Psi_{N,k}(\mathbf{r}, z) \\ & + \int_{-\infty}^{+\infty} dz' \int d^2 \mathbf{r}' V(\mathbf{r}, \mathbf{r}', z, z') \Psi_{N,k}(\mathbf{r}', z') \\ & = E_N(k) \Psi_{N,k}(\mathbf{r}, z)^2, \\ V(\mathbf{r}, \mathbf{r}', z, z') &= - \sum_{N'} \int_{|\mathbf{k}| < k_F'} \frac{d^2 \mathbf{k}'}{(2\pi)^2} K(\mathbf{r} - \mathbf{r}', z, z') \\ & \quad \times \Psi_{N',k'}^+(\mathbf{r}', z') \Psi_{N',k'}(\mathbf{r}, z), \\ K(\mathbf{r} - \mathbf{r}', z, z') &= -2 \int_0^\infty q dq J_0(q|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) D(q, z, z'), \end{aligned} \quad (11)$$

где $K(\mathbf{r} - \mathbf{r}', z, z')$ — кулоновская функция Грина (жирная волнистая линия на рис. 2), описывающая взаимо-

¹ Можно выделить целый класс эрмитовых форм (6), использование которых не влияет на спектр одноэлектронной задачи с гамильтонианом (3) в присутствии любого одночастичного оператора, описывающего внешнее поле [27].

² Для гамильтониана (3) энергетический спектр и волновые функции одноэлектронных состояний зависят от модуля волнового вектора.

действие двух точечных зарядов, находящихся в точках (\mathbf{r}, z) и (\mathbf{r}', z') ; $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ — расстояние между точечными зарядами в плоскости гетероструктуры; $D(q, z, z')$ — фурье-образ кулоновской функции Грина; $J_0(q|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ — функция Бесселя нулевого порядка.

Для описания кулоновского взаимодействия между электронами в квантовой яме AlSb/InAs/AlSb необходимо знать кулоновскую функцию Грина, описывающую взаимодействие двух точечных зарядов в системе. Для нахождения фурье-образа кулоновской функции Грина $D(q, z, z')$ с учетом сил изображения и пространственной дисперсии, обусловленной экранировкой³ зарядов 2D вырожденным электронным газом в КЯ AlSb/InAs/AlSb, решалась задача о движении электрона в плосколистой среде с пространственной дисперсией [30].

Рассмотрим слоистую систему, состоящую из двух полуограниченных сред с диэлектрическими проницаемостями $\epsilon_1(k)$ в области $z < 0$ и $\epsilon_1(k)$ в области $z > d$ (соответствующих барьерам AlSb), разделенных слоем InAs толщиной d с диэлектрической проницаемостью $\epsilon_2(k)$ при $0 \leq z \leq d$. Тогда, используя условие зеркальности для равновесной функции распределения электронов по импульсам на границе раздела сред, с учетом непрерывности электростатического потенциала и нормальной составляющей вектора электростатической индукции на бесконечно тонких границах раздела двух сред функция $D(q, z, z')$ может быть представлена в следующем виде:

$$\begin{aligned} D(q, z, z') = & [\tilde{a}_1(z) - \tilde{a}_S(z) + \tilde{a}_3(z)] \frac{\partial D_S(z, z')}{\partial z} \Big|_{z=0} \\ & + [\tilde{a}_1(z) - \tilde{a}_A(z) - \tilde{a}_3(z)] \frac{\partial D_A(z, z')}{\partial z} \Big|_{z=0} \\ & - \left\{ \tilde{b}_1(z, z') + \frac{1}{2} [\tilde{b}_A(z, z') + \tilde{b}_S(z, z')] + \tilde{b}_3(z, z') \right\}. \end{aligned} \quad (12)$$

Здесь

$$\begin{aligned} \frac{\partial D_{S,A}(z, z')}{\partial z} \Big|_{z=0} = & \frac{1}{B(q)} \\ & \times \left\{ \left[\tilde{a}_1(z') - \frac{1}{2} (\tilde{a}_A(z') + \tilde{a}_S(z')) \right] [\tilde{a}_{A,S}(0) + \tilde{a}_3(d)] \right. \\ & \left. \pm \left[\tilde{a}_3(z') - \frac{1}{2} (\tilde{a}_S(z') - \tilde{a}_A(z')) \right] [\tilde{a}_{A,S}(0) + \tilde{a}_1(0)] \right\}, \end{aligned} \quad (13)$$

где

$$\begin{aligned} B(q) = & [\tilde{a}_S(0) + \tilde{a}_1(0)] [\tilde{a}_3(d) + \tilde{a}_A(0)] \\ & + [\tilde{a}_3(d) + \tilde{a}_S(0)] [\tilde{a}_A(0) + \tilde{a}_1(0)], \end{aligned} \quad (14)$$

³ Экранировка позволяет учесть поля, которые создаются другими электронами, кроме расположенных в точках r и r' . Эти электроны так перестраивают свое распределение в пространстве, что частично компенсируют поле, действующее со стороны одного электрона на другой.

$$\begin{aligned} \tilde{a}_1(z) = & a_1(z)\theta(-z), \quad \tilde{a}_3(z) = a_3(z)\theta(z-d), \\ \tilde{a}_{S,A}(z) = & a_{S,A}(z)\theta(z)\theta(d-z), \quad \theta(z) = \begin{cases} 1, & z > 0, \\ 0, & z < 0. \end{cases} \end{aligned} \quad (15)$$

$$\tilde{b}_1(z, z') = b_1(z, z')\theta(-z)\theta(-z'),$$

$$\tilde{b}_3(z, z') = b_3(z, z')\theta(z-d)\theta(z'-d),$$

$$\tilde{b}_{S,A}(z, z') = b_{S,A}(z, z')\theta(z)\theta(d-z)\theta(z')\theta(d-z'). \quad (16)$$

$$b_{S,A}(z, z') = \frac{1}{2} [\tilde{a}_{S,A}(z+z') + \tilde{a}_{S,A}(z-z')],$$

$$b_{1,3}(z, z') = \frac{1}{2} [\tilde{a}_{1,3}(z+z') + \tilde{a}_{1,3}(z-z')]. \quad (17)$$

Верхний знак («+») в (13) соответствует симметричным („S“), а нижний («-») — антисимметричным („A“) модам [30]. С учетом экранировки 2D электронным газом в симметричной квантовой яме AlSb/InAs/AlSb выражения для $a_1(z)$, $a_3(z)$, $a_A(z)$, $a_S(z)$ принимают вид:

$$\begin{aligned} a_1(z) = a_3(z+d) = & \frac{\exp(-qz)}{\epsilon_1 q + 2\pi e^2 \Pi_{RPA}(q)}, \\ a_S(z) = & \frac{1}{\epsilon_2 q + 2\pi e^2 \Pi_{RPA}(q)} \frac{\text{ch}[(d/2-z)q]}{\text{sh}[qd/2]}, \\ a_A(z) = & \frac{1}{\epsilon_2 q + 2\pi e^2 \Pi_{RPA}(q)} \frac{\text{sh}[(d/2-z)q]}{\text{ch}[qd/2]}, \end{aligned} \quad (18)$$

где Π_{RPA} — поляризационный оператор 2D электронного газа с гамильтонианом, вычисляемый в приближении хаотических фаз.

Для нахождения обменной энергии 2D электронов в КЯ AlSb/InAs/AlSb использовались результаты численного решения системы нелинейных уравнений (1). В качестве огибающих волновых функций одноэлектронных состояний, с использованием которых рассчитывалась обменная энергия, выбирались одноэлектронные волновые функции, полученные в приближении Хартри.

4. Результаты и обсуждение

Все численные расчеты энергетического спектра 2D состояний были выполнены для гетероструктур с 15 нм КЯ InAs [23]. На рис. 3 представлены результаты численного расчета энергетического спектра 2D электронов в гетероструктуре InAs/AlSb с учетом электрон-электронного взаимодействия в приближениях Хартри и Хартри–Фока. Нуль энергии соответствует дну зоны проводимости (без учета энергии размерного квантования) в отсутствие энергии обменного взаимодействия. Из-за наличия в системе электрического поля пространственно разделенных ионизованных доноров в поверхностном слое GaSb и 2D электронов снимается вырождение по спину в энергетическом спектре электронных состояний в КЯ AlSb/InAs/AlSb. Кроме того, видно, что учет обменного взаимодействия приводит к уменьшению энергии электронов в подзонах размерного квантования.

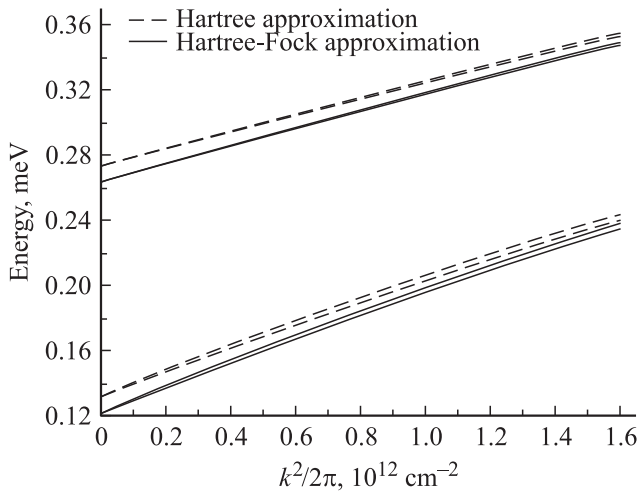


Рис. 3. Результаты расчета энергии для двух нижних подзон размерного квантования от квадрата волнового вектора в приближении Хартри–Фока (сплошные линии) и в приближении Хартри (пунктирные линии) в гетероструктуре InAs/AlSb с шириной квантовой ямы 15 нм и концентрацией 2D электронного газа $1.5 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$.

Отметим, что при нулевой температуре при заполнении только первой подзоны фермиевский волновой вектор, k_F , определяется соотношением $n_S = k_F^2/2\pi$, где n_S — концентрация 2D электронов, а фермиевские вектора k_{+F} и k_{-F} в спиновых подзонах, соответствующие единому уровню Ферми, определяются из следующей системы уравнений:

$$\frac{k_F^2}{2\pi} = \frac{k_{+F}^2}{4\pi} + \frac{k_{-F}^2}{4\pi},$$

$$\varepsilon_{I+}(k_{+F}) = \varepsilon_{I-}(k_{-F}), \quad (19)$$

где $\varepsilon_{I+}(k)$ и $\varepsilon_{I-}(k)$ — верхняя и нижняя спиновые ветви закона дисперсии электронов в нижней подзоне размерного квантования.

Результаты численного расчета расстояния между уровнем Ферми и второй подзоной размерного квантования при различных значениях концентрации 2D электронов в КЯ приведены на рис. 4. Из рисунка видно, что при увеличении концентрации 2D электронов межподзонное расстояние на уровне Ферми уменьшается, а различие в межподзонном расстоянии для разных спиновых подзон возрастает. Учет обменного взаимодействия приводит к увеличению расстояния между подзонами по отношению к значениям, полученным в приближении Хартри. Отметим, что в общем случае заполнения двух и более подзон максимум линии межподзонного поглощения (реальная часть высокочастотной проводимости) в приближении Хартри–Фока не соответствует расстоянию между подзонами размерного квантования⁴ [35].

⁴ Для корректного вычисления межподзонной проводимости в приближении Хартри–Фока необходимо учитывать вклад обменного взаимодействия в вершинную часть.

Спиновое расщепление Рашбы n -й подзоны размерного квантования с непараболическим законом дисперсии определяется как

$$\Delta_n(k) = \varepsilon_{n+}(k) - \varepsilon_{n-}(k). \quad (20)$$

На рис. 5 представлены результаты численного расчета спинового расщепления Рашбы двух подзон размерного квантования в гетероструктуре InAs/AlSb в приближении Хартри. Непараболичность закона дисперсии в зоне проводимости приводит к тому, что расщепление энер-

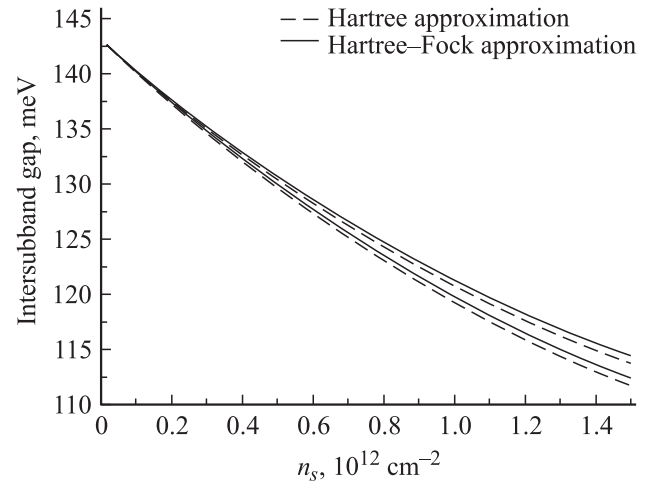


Рис. 4. Расстояние между уровнем Ферми и второй подзоной размерного квантования от концентрации 2D электронов в приближении Хартри–Фока (сплошные линии) и в приближении Хартри (пунктирные линии) в гетероструктуре InAs/AlSb с шириной квантовой ямы 15 нм.

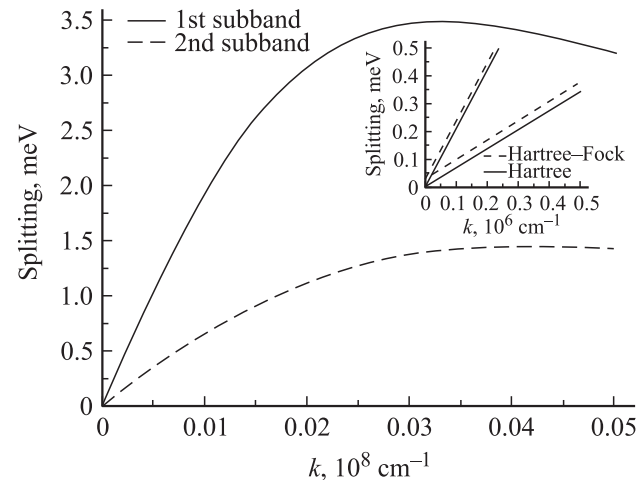


Рис. 5. Спиновое расщепление подзон размерного квантования в зависимости от волнового вектора в приближении Хартри в гетероструктуре InAs/AlSb с шириной квантовой ямы 15 нм и концентрацией 2D электронов $1.5 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$. На вставке — спиновое расщепление подзон в приближении Хартри–Фока (пунктирные линии) и в приближении Хартри (сплошные линии) при малых значениях волнового вектора.

гетического спектра в двух подзонах размерного квантования при фиксированной концентрации 2D электронов различается и оказывается линейным по волновому вектору только вблизи дна подзон размерного квантования, где закон дисперсии можно считать параболическим (вклад недиагональных по спину слагаемых H_1^{SIA} и H_2^{SIA} в расщепление вблизи дна подзон размерного квантования линейен по волновому вектору). На вставке к рис. 5 сравниваются расщепления подзон при малых значениях волнового вектора в приближении Хартри (сплошные линии) и в приближении Хартри–Фока (пунктирные линии). Из-за спин-орбитального расщепления спектра количество электронов в разных спиновых подзонах $k_{+F}^2/4\pi$ и $k_{-F}^2/4\pi$ оказывается различным. Поскольку из принципа запрета Паули кулоновскому взаимодействию в большей степени подвержены электроны из одной спиновой подзоны, обменные поправки к энергиям электронов с разными спиновыми индексами во всех подзонах размерного квантования будут отличаться (из-за разного числа последних). Это приводит к дополнительному увеличению расщепления вследствие обменного взаимодействия.

Для характеристики величины расщепления в подзонах размерного квантования с непараболическим законом дисперсии можно по аналогии с [25], где использовался закон дисперсии

$$\varepsilon_{I\pm}(k) = \hbar^2 k^2 / 2m_C \pm ak,$$

ввести „константу“ спинового расщепления Рашбы в n -й подзоне размерного квантования:

$$\alpha_n(k) = \Delta_n(k) / 2k. \quad (21)$$

На рис. 6 представлены результаты расчетов в приближении Хартри константы спин-орбитального расщепления (21) в гетероструктуре InAs/AlSb в двух подзонах размерного квантования от концентрации 2D электронов. Пунктирная и штрихпунктирная линии представляют зависимости константы спин-орбитального расщепления на дне подзон размерного квантования, сплошная линия соответствует зависимости константы Рашбы при фермиевском волновом векторе. Как видно из рис. 6, константа расщепления Рашбы при фермиевском волновом векторе нелинейно зависит от концентрации 2D электронов, что является не только следствием непараболичности закона дисперсии в зоне проводимости, но и неоднородного из-за электрон-электронного взаимодействия электрического поля в КЯ (слагаемое $e\varphi_{e-e}$ в (1) и (11)). Поскольку в нашей модели $E_{\text{Donors}} \propto n_s/\varepsilon$, нелинейная зависимость от концентрации 2D электронов свидетельствует о нелинейной зависимости константы спин-орбитального расщепления при фермиевском волновом векторе от электрического поля ионизированных доноров покрывающего слоя GaSb. Вблизи дна подзон размерного квантования закон дисперсии можно считать параболическим и зависимость константы расщепления Рашбы от концентрации 2D электронов (и от

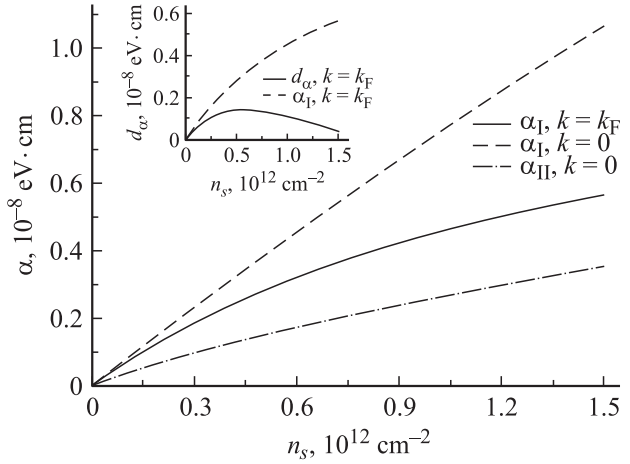


Рис. 6. Константа расщепления Рашбы в приближении Хартри в подзонах размерного квантования при различных значениях волновых векторов от концентрации 2D электронов в гетероструктуре InAs/AlSb с шириной квантовой ямы 15 нм. На вставке — константа расщепления Рашбы (пунктирная линия) и производная спинового расщепления d_α (сплошная линия) при фермиевском волновом векторе от концентрации 2D электронов.

электрического поля ионизированных доноров) является линейной. Наши численные расчеты показывают, что различие константы Рашбы, рассчитанной в приближении Хартри и Хартри–Фока, при всех рассматриваемых значениях волновых векторов и концентрации 2D не превышает 2%, поэтому влиянием обменного взаимодействия на константу спин-орбитального расщепления в гетероструктурах InAs/AlSb можно пренебречь.

В работе [36] в квантовых ямах AlSb/InAs/AlSb шириной 15 нм с одной заполненной подзоной размерного квантования при $T = 1.3$ К наблюдались биения осцилляций Шубникова–де-Гааза, связываемые со спиновым расщеплением спектра электронных состояний в нулевом магнитном поле. Концентрация 2D электронов в КЯ изменялась напряжением на затворе. Величина спинового расщепления при нулевом напряжении на затворе ($n_s = 1.2 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$) при фермиевском волновом векторе $\Delta(k_F)$, определенная из разницы значений концентраций электронов в двух спиновых подзонах, составила 3.2 мэВ (образцы A и B), что соответствует константе спинового расщепления Рашбы $5.83 \cdot 10^{-8} \text{ эВ} \cdot \text{см}$ (см. (21)). Рассчитанная нами в приближении Хартри–Фока величина расщепления при данном значении концентрации составляет $5.06 \cdot 10^{-8} \text{ эВ} \cdot \text{см}$. Незначительное различие в 15% может быть связано с тем, что при определении величины $\Delta(k_F)$ авторами работы [36] нестрого учитывалась непараболичность закона дисперсии электронов в КЯ InAs. Отметим, что учет спиновых слагаемых, появляющихся в гамильтониане из-за отсутствия центра инверсии в элементарной ячейке в объемных материалах InAs и AlSb [26,31], может приводить к увеличению спинового расщепления (см. [37]).

Таким образом, рассчитанные в настоящей работе значения величины спинового расщепления в гетероструктурах $\text{AlSb}/\text{InAs}/\text{AlSb}$ с квантовыми ямами находятся в разумном согласии с экспериментом. Следует отметить, однако, что в литературе имеются противоречивые данные относительно биений осцилляций Шубникова–де-Гааза в таких структурах. В той же работе [36] для одного из исследуемых образцов (образец *C*) приводится вдвое меньшее значение величины расщепления $\Delta(k_F)$, чем для уже упоминавшихся образцов *A* и *B*. Определенная в работе [36] для образцов *A* и *B* „константа“ спинового расщепления α оказывается практически не зависящей от концентрации электронов, в то время как результаты настоящей работы предсказывают сублинейный рост α при увеличении n_s (рис. 6). Наконец, в более поздней работе [38] утверждается, что наблюдаемые биения осцилляций Шубникова–де-Гааза вообще обусловлены неоднородностями образцов и не связаны со спиновым расщеплением. По нашему мнению, эти расхождения могут быть связаны с тем, что структурная асимметрия в образцах InAs/AlSb связана в значительной мере с состоянием поверхности покрывающего слоя GaSb , которое может неконтролируемым образом изменяться при нанесении затвора. Именно поверхностные доноры являются поставщиками электронов в КЯ InAs (до $(5-8) \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$) в номинально нелегированных гетероструктурах высокого качества [27]. В менее чистых структурах (как в работах [36,38]) заметный вклад в концентрацию 2D электронов могут давать глубокие донорные центры в барьерных слоях AlSb , расположенных как сверху (со стороны поверхности), так и снизу от КЯ InAs , что не приводит к асимметрии встроенного электрического поля. В таких структурах изменение состояния поверхности, не приводящее к большим изменениям концентрации 2D электронов, может радикальным образом изменять асимметрию встроенного электрического поля и величину спинового расщепления.

Работа выполнена при поддержке РФФИ (№ 09-02-00752), ФЦП „Научные и научно-педагогические кадры инновационной России“ и Российской академии наук. С.С. Криштопенко благодарит за поддержку Фонд некоммерческих программ „Династия“.

Список литературы

- [1] S. Datta, B. Das. *Appl. Phys. Lett.*, **56**, 665 (1990).
- [2] В.Я. Алёшкин, В.И. Гавриленко, А.В. Иконников, С.С. Криштопенко, Ю.Г. Садофьев, К.Е. Спирин. *ФТП*, **42**, 846 (2008).
- [3] J. Luo, H. Munekata, F.F. Fang, P.J. Stiles. *Phys. Rev. B*, **38**, 10142 (1988).
- [4] J.P. Heida, B.J. van Wees, J.J. Kuipers, T.M. Klapwijk, G. Borghs. *Phys. Rev. B*, **57**, 11911 (1998).
- [5] T. Matsuyama, R. Kursten, C. Meisner, U. Merkt. *Phys. Rev. B*, **61**, 15588 (2000).
- [6] D. Grunder. *Phys. Rev. Lett.*, **84**, 6074 (2000).
- [7] G.L. Chen, J. Han, T.T. Huang, S. Datta, D.B. Janes. *Phys. Rev. B*, **47**, 4084 (1993).
- [8] Ю.Л. Иванов, П.С. Копьев, С.Д. Сучалкин, В.М. Устинов. *Письма ЖЭТФ*, **53**, 470 (1991) [Ju.L. Ivanov, P.S. Kop'ev, S.D. Suchalkin, V.M. Ustinov. *Sov. Phys. JETP Lett.*, **53**, 93 (1991)].
- [9] J. Luo, H. Munekata, F.F. Fang, P.J. Stiles. *Phys. Rev. B*, **41**, 7685 (1990).
- [10] G.A. Khodaparast, R.E. Doezema, S.J. Chung, K.J. Goldammer, M.B. Santos. *Proc. 10th Intern. Conf. on Narrow Gap Semiconductors* (Ishikawa, 2001) (IPAP Conf. Ser. 2) p. 245.
- [11] X.C. Zhang, K. Ortner, A. Pfeuffer-Jeschke, C.R. Becker, G. Landwehr. *Phys. Rev. B*, **69**, 115340 (2004).
- [12] X.C. Zhang, A. Pfeuffer-Jeschke, K. Ortner, V. Hock, H. Buhmann, C.R. Becker, G. Landwehr. *Phys. Rev. B*, **63**, 245305 (2001).
- [13] Y.S. Gui, C.R. Becker, N. Dai, J. Liu, Z.J. Qiu, E.G. Novik, M. Schafer, X.Z. Shu, J.H. Chu, H. Buhmann, L.W. Molenkamp. *Phys. Rev. B*, **70**, 115328 (2004).
- [14] M. Schultz, F. Heinrichs, U. Merkt, T. Colin, T. Skauli, S. Lovold. *Semicond. Sci. Technol.*, **11**, 1168 (1996).
- [15] W. Zawadzki, P. Pfeffer. *Semicond. Sci. Technol.*, **19**, R1 (2004).
- [16] H. Kroemer. *Physica E*, **20**, 196 (2004).
- [17] Yu. G. Sadofyev, A. Ramamoorthy, B. Naser, J.P. Bird, S.R. Johnson, Y.-H. Zhang. *Appl. Phys. Lett.*, **81**, 1833 (2002).
- [18] G. Tuttle, H. Kroemer, J.H. English. *J. Appl. Phys.*, **65**, 5239 (1989).
- [19] G. Tuttle, H. Kroemer, J.H. English. *J. Appl. Phys.*, **67**, 3032 (1990).
- [20] Ch. Gauer, J. Scriba, A. Wixforth, J.P. Kotthaus, C. Nguyen, G. Tuttle, J.H. English, H. Kroemer. *Semicond. Sci. Technol.*, **8**, S137 (1993).
- [21] J. Shen, J.D. Dow, S.Yu. Ren, S. Tehrani, H. Goronkin. *J. Appl. Phys.*, **73**, 8313 (1993).
- [22] J. Shen, H. Goronkin, J.D. Dow, S.Y. Ren. *J. Appl. Phys.*, **77**, 1576 (1995).
- [23] В.Я. Алёшкин, В.И. Гавриленко, Д.М. Гапонова, А.В. Иконников, К.В. Маремьянин, С.В. Морозов, Ю.Г. Садофьев, S.R. Johnson, Y.-H. Zhang. *ФТП*, **39**, 30 (2005).
- [24] S.D. Ganichev, V.V. Bel'kov, L.E. Golub, E.L. Ivchenko, P. Schneider, S. Giglberger, J. Eroms, J. De Boeck, G. Borghs, W. Wegscheider, D. Weiss, W. Prettl. *Phys. Rev. Lett.*, **92**, 256601 (2004).
- [25] Ю.А. Бычков, Э.И. Рашба. *Письма ЖЭТФ*, **39**, 66 (1984).
- [26] G. Dresselhaus. *Phys. Rev.*, **100**, 580 (1955).
- [27] В.И. Гавриленко, А.В. Иконников, С.С. Криштопенко, А.А. Ластовкин, К.В. Маремьянин, Ю.Г. Садофьев, К.Е. Спирин. *ФТТ*, **44**, 642 (2010).
- [28] E.O. Kane. *J. Phys. Chem. Sol* **1**, 249 (1957).
- [29] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках* (М., Наука, 1972) [G.L. Bir, G.E. Pikus. *Symmetry and Strain-Induced Effects in Semiconductors* (Wiley, N.Y., 1974)].
- [30] Ю.А. Романов. *ФТТ*, **47**, 2119 (1979).
- [31] Н. Ашкрофт, Н. Мермин. *Физика твердого тела* (М., Мир, 1979) т. 1, гл. 17, с. 343 [N.W. Ashcroft, N.D. Mermin. *Solid State Physics* (Washington, DC: Holt, Rinehart, and Winston, 1976) chap. 17, p. 344].
- [32] E.O. Kane. *Proc. of Narrow Gap Semiconductors Physics and Applications* (Nimes, 1979), ed. by W. Zawadzki (Springer-Verlag, N.Y., 1980).

- [33] P. Pfeffer, W. Zawadzki. Phys. Rev. B, **59**, R5312 (1999).
- [34] D.Y.K. Ko, J.C. Inkson. Phys. Rev. B, **38**, 9945 (1988).
- [35] T. Ando. Z. Physik B, **26**, 263 (1977).
- [36] J.P. Heida, B.J. van Wees, J.J. Kuipers, T.M. Klapwijk, G. Borghs. Phys. Rev. B, **57**, 11 911 (1998).
- [37] P. Pfeffer. Phys. Rev. B, **59**, 15 902 (1999).
- [38] S. Brosig, K. Ensslin, R.J. Warburton, C. Nguyen, B. Brar, M. Thomas, H. Kroemer. Phys. Rev. B, **60**, R13 989 (1999).

Редактор Л.В. Беляков

Electron-electron interaction and spin-orbit coupling in InAs/AlSb heterostructures with two-dimensional electron gas

*V.I. Gavrilenko, S.S. Krishtopenko, M. Goiran**

Institute for Physics of Microstructures,
Russian Academy of Sciences,
603950 Nizhni Novgorod, Russia

* Laboratoire National
des Champs Magnétiques Intenses,
31400 Toulouse, France

Abstract The electron-electron interaction influence on the energy spectrum of two-dimensional electronic states in InAs/AlSb (001) heterostructures with GaSb cap layer with single filled electric subband has been theoretically studied. Calculations of the two-dimensional electron energy spectrum in Hartree and Hartree–Fock approximations have been performed. It has been shown that the exchange interaction, leading to the electron energy decrease in electric subbands, increases the inter-subband distance and the energy spin-splitting of the subbands in entire electron concentration range with single filled electric subband. The nonlinear dependence of Rashba spin splitting constant with the Fermi wave vector on the two-dimensional electron concentration has been demonstrated.