УДК 621.315.592

© 2006 р. **В.І. Іванов, В.К. Дугаєв**

Чернівецьке відділення Інституту проблем матеріалознавства НАН України, Чернівці

# НАПІВПРОВІДНИКОВІ КВАНТОВІ ЯМИ ЗІ СПІН-ОРБІТАЛЬНОЮ ВЗАЄМОДІЄЮ РАШБИ

Досліджено залежність константи спін-орбітальної взаємодії Рашби від параметрів несиметричної квантової ями. Потенціал брався у вигляді деякої гладкої функції, яка залежить від технології виготовлення структури. Проаналізовано вплив спін-орбітальної взаємодії на енергетичний спектр, хвильові функції системи та густину станів. Числові розрахунки проводились для квантових ям типу InAs/GaSb.

The dependence of a Rashba constant of spin-orbit interaction on the parameters of asymmetric quantum well is studied. The potential is taken in the form of a smooth function depending on the technology of manufacturing the structure. The effect of spin-orbit interaction on the energy spectrum, wave functions and the density of states is analyzed. The numerical calculations are performed for the InAs/GaSb quantum well.

## Вступ

Детальне розуміння транспортних властивостей, пов'язаних зі спін-орбітальною (СО) взаємодією у двовимірних системах, важливо як у фундаментальному, так і в прикладному відношенні у зв'язку з появою нового типу спінтронних пристроїв [1, 2]. Одним із перших таких приладів є транзистор Датта і Даса [3], принцип роботи якого базується на прецесії спіну електрона внаслідок СО розщеплення Рашби [4-6]. Останнім часом інтерес до СО взаємодії в низькорозмірних структурах надзвичайно збільшився, оскільки стало зрозуміло, що такі транспортні властивості, як аномальний та спіновий ефекти Холла в магнітних напівпровідниках, вельми чутливі до величини СО розщеплення [7].

Спінове розщеплення Рашби електронів у двовимірному електронному газі в основному пов'язують із наявністю макроскопічного електричного поля в асиметричних квантових ямах. Цей ефект більш виражений у вузькозонних напівпровідникових шарах, таких як InAs або InGaAs.

У більшості випадків у теорії використовують модельний гамільтоніан Рашби з константою СО взаємодії, яка не обчислюється, а береться з експерименту. Це пов'язано з тим, що СО взаємодія в кристалічному тілі дуже суттєво відрізняється від стандартної релятивістської величини для СО взаємодії у вакуумі. Отже, важко обчислити точно цю величину для напівпровідників із квантовими ямами. Але з іншого боку, можна знайти теоретично, як залежить ефективна константа СО взаємодії від параметрів квантової ями, таких як величина енергетичного бар'єра на інтерфейсі, асиметрія ями, а також номер квантової підзони. Саме така задача ставиться в даній роботі.

Зазначимо, що розрахунки СО розщеплення проводились раніше для напівпровідникового інтерфейсу, причому в модель була включена міжзонна взаємодія [8], що значно ускладнює задачу навіть у найпростішому випадку. В даній роботі ми пов'язуємо залежність ефективної СО взаємодії від параметрів КЯ в рамках простої однозонної моделі з релятивістським доданком стандартного типу.

## Спін-орбітальна взаємодія

Гамільтоніан електронної системи при врахуванні СО взаємодії має вигляд

$$H = \frac{\hbar^2}{2m}\Delta - ig\left[\nabla V(\vec{r})\right]\left(\vec{\sigma}\times\nabla\right) + V(\vec{r}), \quad (1)$$

де $m$ – ефективна маса електрона, $\vec{\sigma}=(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ – спінові матриці Паулі, $V(\vec{r})$ – потенціал квантової ями, $g$ – постійна спін-орбітального зв'язку, яка залежить від параметрів кристалічної гратки і деталей зонної структури.

Розглянемо модель асиметричної квантової ями (КЯ) з прямокутним потенціалом $V(z)$, який залежить лише від однієї координати. В такому випадку похідна $dV/dz$ у рівнянні (1) є невизначеною при $z$=0 та $z$=$L$ ($L$ – довжина КЯ). Цю складність ми усуваємо апроксимацією $V(z)$ деякою гладкою функцію

$$V(z)=\frac{U_1}{2}\left[1-\mathrm{th}(\beta_1 z)\right]+ +\frac{U_2}{2}\left[1-\mathrm{th}(\beta_2(L-z))\right], \qquad (2)$$

де $\beta_{1,2}$ – постійні, що характеризують перехід, причому $\beta_1^{-1}$, $\beta_2^{-1}$ <<$L$. У реальній напівпровідниковій системі ці величини залежать від технології виготовлення структури.

Визначимо хвильову функцію системи у вигляді $\varphi_{\vec{k}}(\vec{r})=e^{i(k_x x+k_y y)}\chi_{\vec{k}}(z)$ ($\vec{k}$ – момент уздовж КЯ). Для знаходження розв'язків рівняння (1) розкладемо $\chi_{\vec{k}}(z)$ за деякою повною системою ортонормованих функцій. За таку систему зручно взяти відомі хвильові функції $\phi_n(z)$ одномірної моделі, гамільтоніан якої

$$H_{1D}=-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dz^2}+V(z). \qquad (3)$$

Тоді розклад запишеться як

$$\chi_{\vec{k}}(z)=\sum_n \lambda_{n\vec{k}}\phi_n(z). \qquad (4)$$

Підставивши (4) у рівняння Шредінгера з гамільтоніаном (1), після виконання розрахунків ми отримаємо систему взаємопов'язаних рівнянь для коефіцієнтів $\lambda_{n\vec{k}}$

$$\sum_{n'}\left(\frac{h^2k^2}{2m}+\varepsilon_n-E\right)\delta_{nn'}\lambda_{n'\vec{k}}+ +\sum_{n'}g\left(\sigma_x k_y-\sigma_y k_x\right)w_{nn'}\lambda_{n'\vec{k}}=0, \qquad (5)$$

де

$$w_{nn'}=\int_{-\infty}^{\infty}\phi_n^*(z)\frac{dV}{dz}\phi_{n'}(z)dz. \qquad (6)$$

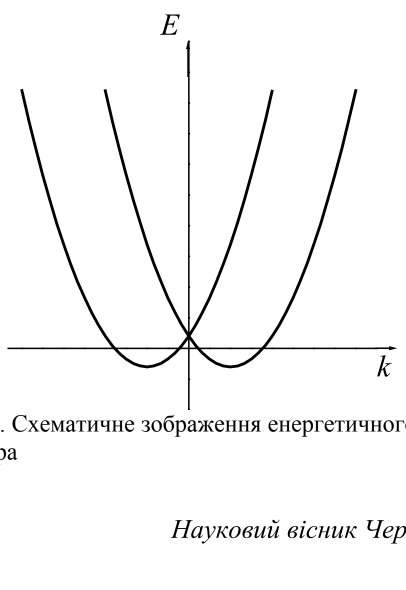


Рис. 1. Схематичне зображення енергетичного спектра

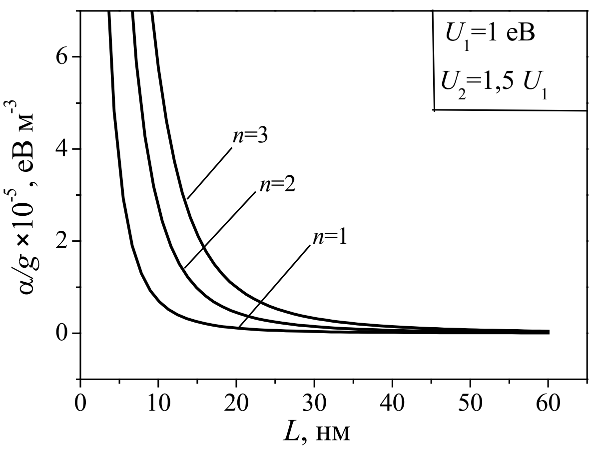


Рис. 2. Залежність величини $\alpha_n/g$ від ширини квантової ями

Власні значення $\varepsilon_n$ гамільтоніана $H_{1D}$ знаходяться числовими методами з такого рівняння [9]:

$$q_n L=\pi n-\arcsin\frac{q_n\hbar}{\sqrt{2mU_1}}-\arcsin\frac{q_n\hbar}{\sqrt{2mU_2}}, \qquad (7)$$

де $q_n=(2m\varepsilon_n)^{1/2}/\hbar$. Відповідні хвильові функції мають такий вигляд:

$$\phi_n(z)=\left[2\left(L+\kappa_{1n}^{-1}+\kappa_{2n}^{-1}\right)\right]^{-1/2}\times \times\begin{cases} e^{\kappa_{1n}z}\sin\delta, & z<0,\\ \sin(q_n z+\delta), & 0\le z\le\delta,\\ e^{-\kappa_{2n}(z-L)}\sin(q_n L+\delta), & z>L, \end{cases} \qquad (8)$$

де $\mathrm{tg}(\delta)=q_n/\kappa_{1n}$, $\kappa_{1n}=\left[2m(U_1-\varepsilon_n)\right]^{1/2}/\hbar^2$, $\kappa_{2n}=\left[2m(U_2-\varepsilon_n)\right]^{1/2}/\hbar^2$.

Припустимо тепер, що СО взаємодія незначна, і ми можемо знехтувати СО взаємодією між квантованими рівнями. На практиці це означає, що рівні не лежать близько один біля одного. Тоді, використовуючи вищенаведені формули (5) і (6), ми отримаємо рівняння Шредінгера з гамільтоніаном Рашби

$$\left[\frac{\hbar^2k^2}{2m}+\alpha_n\left(\sigma_x k_y-\sigma_y k_x\right)+\varepsilon_n-E\right]\lambda_{n\vec{k}}=0, \qquad (9)$$

де $\alpha_n=gw_{nn'}$ – ефективна постійна СО зв'язку для електронів підзони з номером $n$ в КЯ. Використовуючи формули (2), (6) та (8), знаходимо

$$\alpha_n=\frac{gq_n^2\left((3U_2-2\varepsilon_n)\beta_2^{-2}-(3U_1-2\varepsilon_n)\beta_1^{-2}\right)}{128\left(L+\kappa_{1n}^{-1}+\kappa_{2n}^{-1}\right)}. \qquad (10)$$

На рис. 2 наведено залежність величини $\alpha_n/g$ від ширини КЯ для різних квантованих рівнів.

Для числових розрахунків використано параметри КЯ InAs/GaSb. Ефективна маса InAs приймалася такою, що дорівнює 0,04 $m_0$, а висота нижчої стінки ями – 1 еВ.

Енергетичний спектр нашої системи можна знайти з рівняння (9)

$$E_{n1,2}(k) = \varepsilon_n + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \mp \alpha_n k\,, \qquad (11)$$

де індекси "1, 2" відповідають СО розщепленим зонам (рис. 1). Відповідні хвильові функції будуть спінорами і їх можливо також знайти з рівняння (9) у такому вигляді:

$$\lambda^{(1)}_{n\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ ik_+ / k \end{pmatrix}, \qquad (12)$$

$$\lambda^{(2)}_{n\vec{k}} = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} ik_- / k \\ 1 \end{pmatrix}, \qquad (13)$$

де $k_\pm = k_x \pm ik_y$.

Зазначимо, що хвильові функції (12) і (13) є спінорами з ненульовими компонентами, навіть якщо СО взаємодія прямує до нуля. Іншими словами, власні функції є завжди суперпозицією станів зі спіном вздовж та проти осі квантування, яку ми вибрали перпендикулярно до площини КЯ. Це пов'язано з виродженням у точці $k$=0 (див. рис. 1).

**Густина станів**

Важливою величиною, яку треба знати на практиці, є густина електронних станів, яка визначається співвідношенням

$$\nu(\varepsilon) = \sum_{ni}\int \delta\left[\varepsilon - E_{ni}(k)\right]\frac{d^2\vec{k}}{(2\pi)^2}\,, \qquad (14)$$

де $i$=1, 2. Згідно з (14), густину станів можна записати як суму парціальних внесків від кожної підзони. Тобто

$$\nu(\varepsilon) = \sum_{ni} \nu_{ni}(\varepsilon)\,. \qquad (15)$$

У нашому випадку, провівши розрахунки, ми знаходимо

$$\nu_{n1,2}(\varepsilon) = \frac{m}{2\pi\hbar^2}\left(1 \pm \frac{m\alpha_n}{\sqrt{m^2\alpha_n^2 - 2m\hbar^2(\varepsilon_n - \varepsilon)}}\right), \qquad (16)$$

коли $\varepsilon > \varepsilon_n$ та

$$\nu_{n1}(\varepsilon) = \frac{m^2\alpha_n}{\pi\hbar^2\sqrt{m^2\alpha_n^2 - 2m\hbar^2(\varepsilon_n - \varepsilon)}}, \qquad (17)$$
$$\nu_{n2}(\varepsilon) = 0,$$

коли $\varepsilon_n - m\alpha_n^2 / 2\hbar^2 < \varepsilon < \varepsilon_n$.

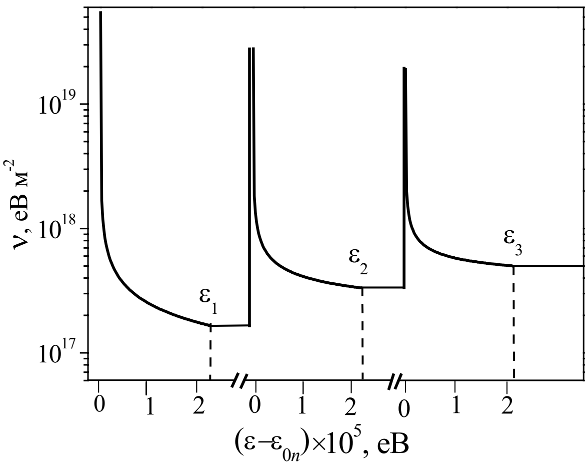


Рис. 3. Залежність густини станів від енергії ($\varepsilon_1$~0,02 еВ, $\varepsilon_2$~0,08 еВ, $\varepsilon_3$~0,18 еВ)

На рис. 3 наведено залежність даної величини від енергії. При розрахунках приймалось, що для InAs/GaSb КЯ $\alpha_n$=0,9·10$^{-11}$ еВ·м [6]. Для зручності зображення результатів відлік енергії для кожного рівня починався від величини $\varepsilon_0 = = \varepsilon_n - m\alpha_n / 2\hbar^2$. Як бачимо, діапазон різкого зменшення густини станів складає лише соті меВ. У реальних гетероструктурах величина $\alpha_n$ може зростати при прикладанні напруги до переходу, а відповідно збільшується і даний діапазон. Так, якщо взяти $\alpha_n$=10$^{-10}$ еВ·м, то величина $\varepsilon$–$\varepsilon_0$ стає 2,61 меВ.

Різкі піки на залежності густини станів від енергії пов'язані з існуванням цілої лінії енергетичних мінімумів в оберненому просторі.

**Висновки**

Проведено дослідження впливу СО взаємодії на параметри несиметричних КЯ. Знайдена постійна СО взаємодії $\alpha_n$ у випадку, коли потенціал КЯ можна апроксимувати гладкою функцією, яка задається формулою (2). З рис. 2 видно, що $\alpha_n$ зростає зі збільшенням квантового номера підзони і стає більшою у вузьких КЯ.

Врахування СО взаємодії призводить до зміни енергетичного спектра в напівпровідниках. Кожна зона розщеплюється на дві з різними напрямками спіну (формула (11), рис. 1) і різними хвильовими функціями (формули (12) і (13)).

Залежність густини станів від енергії також змінюється під впливом СО взаємодії. Замість звичайного сходинкоподібного вигляду, притаманного двовимірним системам, на графіку з'являються проміжки, в яких густина станів стрімко зростає до деякого значення, а потім різко спадає (рис. 3). Ці області розташовані на шкалі енергій на початку кожного нового енергетичного рівня. Розрахунки, проведені для КЯ InAs/GaSb із затравочною релятивістською константою, показують, що діапазони таких стрибків досить малі (соті меВ) і сильно залежать від $\alpha_n$. Ця величина насправді є дещо більшою [6, 8] (десяті меВ), що відповідає посиленню ефективної константи СО зв'язку *g* приблизно в 10 разів.

## СПИСОК ЛІТЕРАТУРИ


1. *Gregg J.F., Petej I., Jouguelet E., Dennis C.* Spin electronics – a review // J. Phys. D: Appl. Phys. – 2002. – **35**, No.18. – P. R121-R155.
2. *Zutic I., Fabian J., Das Sarma S.* Spintronics: fundamentals and applications // Rev. Mod. Phys. – 2004. – **76**, No.2. – P.323-410.
3. *Datta S., Das B.* Electronic analog of the electro-optic modulator // Appl. Phys. Lett. – 1990. – **56**, No.7. – P.665-667.
4. *Bychkov Y.A., Rashba E.I.* Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers. J. Phys. C. – 1984. – **17**, No.33. – P.6039-6045.
5. *Rashba E.I., Sherman E.Ya*. Spin-orbital band splitting in symmetric quantum wells // Phys. Lett. A – 1988. – **129**, No.3. – P.175-179.
6. N*itta J., Akazaki T., Takayanagi H.* Gate control of spin-orbit interaction in an inverted heterostructure // Phys. Rev. Lett. – 1997. – **78**, No.7. – P.1335-1338.
7. *Dugaev V.K., Bruno P. et al.* Anomalous hall effect in a two-dimensional electron gas with spin-orbital interaction // Phys. Rev. B. – 2005. – **71**, No.22. – P. 224423.
8. *Pfeffer P, Zawadzki W.* Spin splitting of conduction subbands in GaAs-$Ga_{0,7}Al_{0,3}As$ heterostructures // Phys. Rev. B – 1995. – **52**, No.20. – P. R14332-R14335.
9. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. Нерелятивистская теория. – М.: Наука, 1974.