

КВАНТОМЕХАНИЧЕСКИЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СВЕРХРЕШЕТКАХ В СИЛЬНЫХ МАГНИТНЫХ ПОЛЯХ

И. В. Пенягин

ФГУП «РФЯЦ-ВНИИЭФ», г. Саров Нижегородской обл.

Введение

Задача о квантовомеханическом движении носителей заряда в полупроводниковых структурах, помещенных во внешнее магнитное поле, имеет более чем полувековую историю [1–7]. С того момента, как Ландау решил задачу о движении заряженной частицы в перпендикулярном магнитном поле, стало ясно, что действия периодического поля кристалла и магнитного поля на электрон или дырку в полупроводнике существенно рознятся по характеру. Так, магнитное поле квантует поперечное движение заряженной частицы, а поле кристаллической решетки приводит к образованию энергетических зон. В результате в зонах проводимости и в валентной зоне в магнитном поле формируются «лестницы» уровней Ландау. В действительности, как показывают результаты первых теоретических работ, выполненных в 1960-х годах (см., например, [6]), уровни Ландау в кристаллах уширяются в зоны экспоненциально малой ширины. Причиной тому является снятие вырождения состояний частицы в магнитном поле по центру орбиты вследствие взаимодействия ее с электростатическим периодическим полем кристалла.

Следует отметить, что экспериментальное наблюдение расщепленной зонной структуры в реальных кристаллах, помещенных в магнитное поле, существенно затруднено тем, что для этого необходимо генерировать мегагауссные магнитные поля. В то же время, искусственные полупроводниковые кристаллы – сверхрешетки, – с периодом в несколько десятков нанометров являются перспективными объектами для теоретического и экспериментального исследования магнитных блоховских состояний носителей, а так же для создания на их базе фоточувствительных приборов, лазеров, спиновых фильтров и клапанов. Следует отметить, что интерес к сверхрешеткам возник полвека назад после того, как Л. В. Келдыш опубликовал свою работу [8], где изложил идею создания сверхпериодичности в кристалле с помощью акустической волны. Следует отметить, что с тех пор, как были опубликованы первые работы по сверхрешеткам, вплоть до настоящего времени интерес к этим квантовым структурам не ослабевает. Так, следуя хронологическому порядку, в присутствии высокочастотного поля в одномерных сверхрешетках были предсказаны эффекты абсолютной отрицательной проводимости, полной самоиндуцированной прозрачности, осциллирующей зависимости тока от напряженности высокочастотного поля

[9–12], предсказано наличие резонанса статического тока в полупроводниках со сверхрешеткой при совпадении кратных ларморовской и штарковской частот [13]. Наличие в минизоне сверхрешетки областей с отрицательной эффективной массой оказалось определяющим для экспериментально обнаруженного эффекта Шапиро в сверхрешетке [14], и, если размер данной области занимает значительную часть зоны Бриллюэна, то наряду с эффектом брэгговского отражения отрицательная эффективная масса становится причиной возникновения отрицательной дифференциальной проводимости (ОДП) [15].

Постановка задачи. Теоретическая модель

Гамильтониан, описывающий квантовомеханическое движение электрона в двумерной двоякопериодической квадратной сверхрешетке, в постоянном однородном магнитном поле, с учетом эффекта Зеемана и спин-орбитального взаимодействия Рашба в газе носителей имеет вид:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V(x, y) = \frac{\left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}\right)^2}{2m^*} \hat{E} + \frac{\alpha}{\hbar} [\mathbf{z} \cdot \hat{\sigma}] \left(\hat{\mathbf{p}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}\right) - g\mu_B H \hat{\sigma}_z + V(x, y), \quad (1)$$

где μ_B – магнетон Бора, \hat{E} – единичная матрица размерности 2×2 , m^* – эффективная масса электрона вблизи дна зоны проводимости, c – скорость света, $\hat{\mathbf{p}}$ – оператор импульса, $\hat{\sigma}$ – вектор, составленный из матриц Паули, α – константа спин-орбитального взаимодействия Рашба. Для векторного потенциала магнитного поля выберем калибровку Ландау $\mathbf{A} = (0, H \cdot x, 0)$, так что $\mathbf{H} \parallel OZ$. Функция

$$V(x, y) = V_1 \cos^2\left(\frac{\pi x}{a}\right) \cos^2\left(\frac{\pi y}{a}\right) + V_2 \left(\sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) + \sin\left(\frac{2\pi y}{a}\right) \right) \quad (2)$$

моделирует периодический электростатический потенциал поля двумерной сверхрешетки с периодом a , амплитуды потенциала V_1 и V_2 ответственны за centrosymmetricную и неcentrosymmetricную его часть, соответственно.

Структура гамильтоновской матрицы. Метод решения

В работе [16] была аналитически решена задача о квантовых состояниях двумерного электрона с гамильтонианом \hat{H}_0 , было найдено аналитическое выражение для спектра, волновых функций. В достаточно сильном магнитном поле спектр представляет собой пары уровней с характерным расстоянием между парами, равным энергии Ландау $\hbar\omega_c$, и расщеплением порядка суммы зеемановского сдвига и энергии СО-взаимодействия. При этом для актуальных для современных экспериментов параметров сверхрешеток [17] и величин напряженности магнитного поля порядка , энергии зеемановского расщепления в спектре, спин-орбитального взаимодействия и расщепления в спектре, обусловленного действием электростатического поля сверхрешетки на электрон, оказываются сопоставимыми между собой.

$$\hbar\omega_c \gg V_1; V_2, \quad V_{1,2} \approx E_{SO} \quad (3)$$

В таком случае становится оправданным расчет квантовых состояний электрона с гамильтонианом (1) в так называемом двухуровневом приближении [18], когда исключается примесь состояний невозмущенных пар уровней в состоянии магнитных блоховских подзон рассматриваемой выбранной пары с заданным значением S . При этом ширина расщепленной зонной структуры уровней пары много меньше характерной энергии Ландау. Рассчитаем далее квантовые состояния лишь первых двух энергетических уровней основной пары, а именно E_0^+ и E_1^- .

Волновая функция электрона, являющаяся одновременно и собственной функцией оператора магнитной трансляции [8], может быть представлена в виде симметризованной линейной комбинации состояний первой пары уровней [18]:

$$\begin{aligned} \Psi_k(x, y) &= \begin{pmatrix} \Psi_{1k}(x, y) \\ \Psi_{2k}(x, y) \end{pmatrix} = \\ &= \sum_{n=1}^p \sum_{l=-\infty}^{\infty} e^{ik_x a(lp+n)q/p} e^{2\pi i y(lp+n)/a} \times \\ &\times \left(A_n(k) \psi_{0nlk}^+(x, y) + B_n(k) \psi_{1nlk}^-(x, y) \right), \end{aligned} \quad (4)$$

где $\psi_{0nlk}^+(x, y)$ и $\psi_{1nlk}^-(x, y)$ – спинорные волновые функции первых двух уровней,

В представлении оператора \hat{H}_0 оператор Гамильтона (1) представляется матрицей размерности $2p \cdot 2p$ и имеет блочный вид:

$$\begin{pmatrix} (A) & (AB)^* \\ (AB) & (B) \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Каждый из блоков представляет собой квазитрдиагональную матрицу размерности $p \times p$. Мат-

ричные элементы гамильтониана были рассчитаны нами аналитически и приведены в работе [19].

В собственном базисе гамильтониана \hat{H}_0 уравнение Шредингера представляет собой систему линейных алгебраических уравнений относительно коэффициентов $A_n(\mathbf{k})$ и $B_n(\mathbf{k})$ разложения волновой функции электрона по базисным состояниям. Данная система уравнений решалась нами численно с привлечением метода унитарных преобразований для диагонализации эрмитовских матриц: был использован метод Хаусхолдера в совокупности с QL-QR-алгоритмами.

Квантовые состояния: результаты расчетов

Все расчетные параметры были максимально приближены к известным из экспериментов [17] для решеточных структур $In_{0,23}Ga_{0,77}As/GaAs$:

$$m^* = 0,05m_e, \quad \alpha = 2,5 \cdot 10^{-11} eV\text{m}, \quad a = 80\text{nm}, \quad g = -4.$$

В низшей из подзон нами был рассчитан закон дисперсии электрона $E_1(k)$ (см. рис. 1). Функция $E_1(k)$ является четной функцией квазиимпульса в магнитной зоне Бриллюэна, поскольку периодический потенциал (2) поля сверхрешетки, в данном случае, центросимметричен. В случае нецентросимметричного потенциала решетки симметрия закона дисперсии понижается (см. рис. 2).

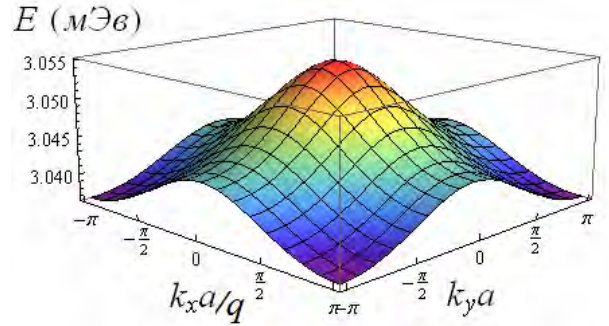


Рис. 1. Основная подзона спектра гамильтониана (1) при $V_2 = 0$

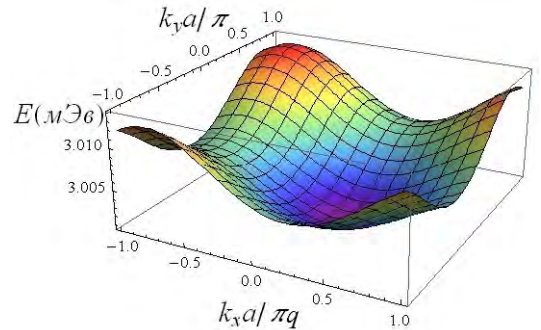


Рис. 2. Основная подзона спектра гамильтониана (1) при $V_2 = 0,1 \cdot V_1$

Проведенные нами модельные расчеты показывают, что в случае, когда потенциал сверхрешетки не обладает центром инверсии, экстремумы законов дисперсии энергетических подзон смещены относительно центра МЗБ вдоль линии $k_y = -k_x$ (см. рис. 3).

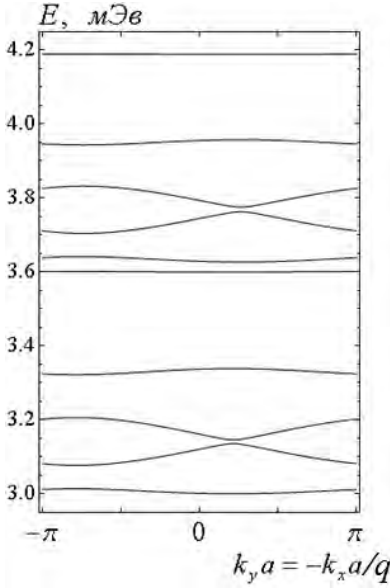


Рис. 3. Законы дисперсии в магнитных блоховских подзонах при $V_2 = 0, 1V_1$

Кроме того, непосредственными расчетами показано, что при соотношении между амплитудами потенциала $V_2/V_1 \approx 0,13$ вторая и третья магнитные подзоны мгновенно касаются друг друга в некоторой точке магнитной зоны Бриллюэна. Ожидалось, что это скажется на перестройке распределения средних спинов электрона в плоскости газа, однако дальнейшие расчеты не подтвердили этого предположения.

В работе также был выполнен расчет средних значений проекций спина электрона в магнитных подзонах

$$\langle S_i^\mu(\mathbf{k}) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \Psi_{\mathbf{k}}^{\mu*}(x, y) \hat{\sigma}_i \Psi_{\mathbf{k}}^{\mu}(x, y) dx dy, \quad (6)$$

где $i = x, y, z$; μ – номер подзоны.

На рис. 4 приведены результаты расчетов векторного поля средних значений проекций спина в плоскости электронного газа в случаях centrosymmetric, рис. 4,а, и noncentrosymmetric, рис. 4,б, периодического потенциала при $p/q = 5/1$ в нижней подзоне. Векторное поле среднего спина в плоскости, перпендикулярной магнитному полю, имеет вихревую структуру, линии векторного поля являются касательными к изображенным изоэнергетическим линиям. Если потенциал centrosymmetric, спиновая намагниченность в плоскости газа равна нулю.

$$\sum_i^\mu = \iint_{\text{МЗБ}} \langle S_i^\mu(\mathbf{k}) \rangle dk_x dk_y, \quad (i = x, y) \quad (7)$$

В случае нецентросимметричного $V_2 \neq 0$ периодического потенциала в перпендикулярном магнитном поле появляется спиновая намагниченность в плоскости газа. Отсутствие инверсионной симметрии периодического электростатического поля сверхрешетки является необходимым условием возникновения данного эффекта в электронном газе со спин-орбитальным взаимодействием в изучаемых структурах.

По результатам изложенных исследований была опубликована статья [19].

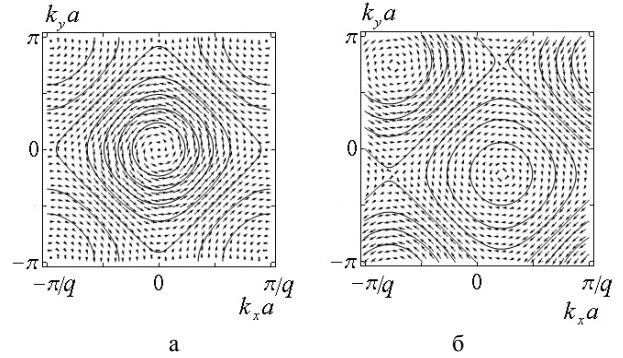


Рис. 4. Векторное поле средних значений проекций спина в плоскости электронного газа в случаях: а – $V_1 = 1\text{meV}, V_2 = 0\text{meV}$; б – $V_1 = 1\text{meV}, V_2 = 0, 1\text{meV}$

Квантовые состояния в присутствии постоянного электрического поля

Изучим влияние слабого электрического поля на квантовые состояния носителей в рассматриваемых системах. Решение данной задачи проводилось методом теории возмущений. Аналитически были рассчитаны матричные элементы возмущающего электростатического потенциала, а численно были проведены расчеты спектра, ВАХ структуры.

Гамильтониан слабого электростатического поля, направленного вдоль оси Ox , имеет вид

$$\hat{W} = eEx. \quad (8)$$

Матричные элементы оператора возмущающего электростатического поля были рассчитаны аналитически и имеют вид

$$W(\mathbf{k})_{\alpha\gamma} = \frac{e\epsilon l_H^2}{qa\sqrt{2}} \frac{D_1}{\sqrt{1+D_1^2}} \sum_{j=1}^p \sum_{i=1}^p \times \left(\left(A_j^\alpha(\mathbf{k}) \right)^* B_j^\gamma(\mathbf{k}) + \left(B_j^\alpha(\mathbf{k}) \right)^* A_j^\gamma(\mathbf{k}) \right). \quad (9)$$

Здесь $A_j^\alpha(\mathbf{k})$ – j -ая компонента собственного вектора для состояния с вектором \mathbf{k} в подзоне с номером α . $B_j^\alpha(\mathbf{k})$ – $(j+p)$ -ая компонента собственного вектора для подзоны с номером α .

На рис. 5 представлены результаты расчетов поправки к спектру электрона в основной магнитной блоховской подзоне (рис. 1) в электрическом поле

$E_x = 100 \frac{\text{В}}{\text{см}}$. На масштабе магнитной зоны Бриллюэна знакопеременный диагональный матричный элемент $W_{11}(\mathbf{k})$ оператора \hat{W} приводит к исчезновению симметрии поворотной оси четвертого порядка в законе дисперсии электрона в минузоне.

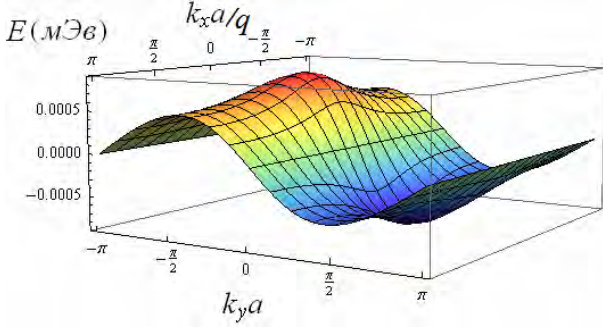


Рис. 5. Поправка к энергии электрона в основной энергетической подзоне при $E_x = 100 \frac{\text{В}}{\text{см}}$

Транспорт носителей в направлении электрического поля

Для анализа транспортных свойств модельного материала в слабом электрическом поле была рассчитана неравновесная функция распределения $f^\mu(\mathbf{k}, E_x)$ носителей заряда в n -ой магнитной подзоне, исходя из численного решения квазиклассического однородного кинетического уравнения Больцмана в τ -приближении методом Эйлера:

$$\frac{E_x e a}{\hbar} \frac{\partial f^\mu(\mathbf{k}, E_x)}{\partial k_x a} = -\frac{1}{\tau} (f^\mu(\mathbf{k}, E_x) - F(\mathbf{k})), \quad (10)$$

где $F(\mathbf{k})$ – равновесная функция распределения Ферми-Дирака.

На рис. 6 представлена функция распределения электронов в основной магнитной блоховской подзоне при $E_x = 100 \frac{\text{В}}{\text{см}}$. В отличие от равновесной функции она не обладает симметрией поворотной оси четвертого порядка в магнитной зоне Бриллюэна, и в электрическом поле распределение носителей смещается в холловском направлении.

В нижней магнитной подзоне был проведен расчет величины поверхностной плотности электрического тока j_x как функции внешнего постоянного однородного электрического поля

$$j_x^\mu = \frac{|e|^2}{(2\pi)^2} \iint_{k \in \text{MBZ}} dk_x dk_y v_x^\mu(\mathbf{k}) f^\mu(\mathbf{k}, E_x). \quad (11)$$

Уровень Ферми при расчетах располагался в следующей за рассматриваемой магнитной подзоной энергетической щели, так что концентрация

носителей составляла малую величину порядка $n = 10^{10} \text{ см}^{-2}$. Проекция вектора скорости электрона на направление электрического поля и его эффективная масса в подзоне Ландау существенным образом зависят от точки в магнитной зоне Бриллюэна, по которой ведется интегрирование в выражении (11). На рис.7 представлена зависимость поверхностной плотности электрического тока в основной магнитной блоховской подзоне от величины напряженности внешнего электрического поля.

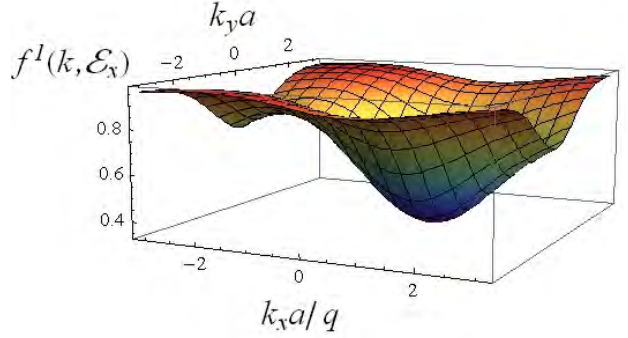


Рис. 6. Функция распределения электронов в основной магнитной блоховской подзоне при $E_x = 100 \frac{\text{В}}{\text{см}}$, $V_2 = 0, 1V_1$

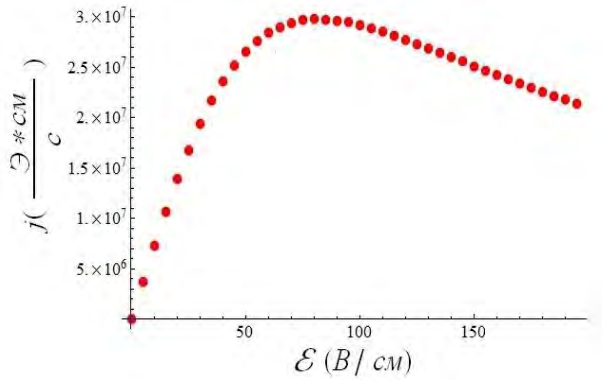


Рис. 7. ВАХ модельного материала (время релаксации импульса $\tau = 10^{-12} \text{ с}$) при $V_2 = 0, 1V_1$

Расчеты показывают, что имеет место переход от линейной вольт-амперной характеристики структуры к участку насыщения поверхностного тока с его последующим уменьшением с возрастанием напряженности внешнего электрического поля. В области значений напряженности электрического поля, соответствующей равенству между штарковской частотой и обратным временем релаксации импульса, наблюдается, таким образом, переход от омического участка ВАХ к участку с отрицательной дифференциальной проводимостью.

Вольт-амперная характеристика исследуемого модельного материала существенно зависит от доли вклада нецентросимметричной части периодического потенциала (см. рис. 8).

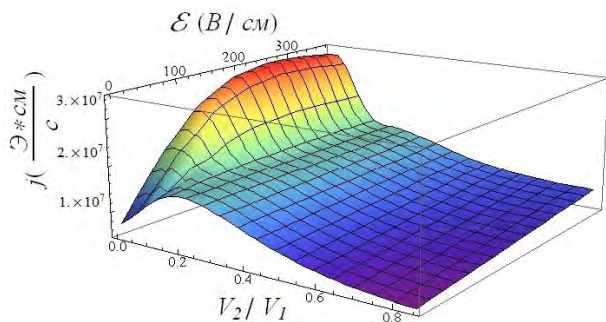


Рис. 8. Зависимость ВАХ от вклада нецентросимметричной части периодического потенциала

Заключение

В ходе работы впервые был рассчитан спектр электрона, находящегося в нецентросимметричном двоякопериодическом потенциале и перпендикулярном магнитном поле при учете спин-орбитального взаимодействия. Показано, что для случая центросимметричного знакопостоянного периодического потенциала энергетические подзоны в сильном магнитном поле группируются по одну сторону от положения каждого из невозмущенных уровней энергии в паре. В отсутствие нецентросимметричного вклада в потенциале наблюдается симметрия C_{4v} для законов дисперсии в магнитной зоне Бриллюэна, в присутствии – симметрия закона дисперсии в подзонах понижается до C_S – симметрии периодического потенциала при $V_1 \neq 0; V_2 \neq 0$.

Были рассчитаны распределения среднего спина в состояниях магнитных подзон в случаях центросимметричного и нецентросимметричного модельных потенциалов сверхрешетки. Показано, что имеет место вихревая структура распределения спинов в плоскости электронного газа. Следует отметить, что в случае центросимметричного потенциала, спиновая намагниченность газа в полностью заполненной подзоне равна нулю.

Была решена задача о квантовомеханическом движении блоховского электрона в скрещенных взаимно перпендикулярных постоянных однородных магнитном и электрическом полях. Влияние электрического поля на электрон учитывалось в первом порядке стационарной теории возмущений. Исследована симметрия законов дисперсии и рассчитано распределение носителей по энергиям в магнитных подзонах Ландау в зависимости от величины напряженности внешнего электрического поля. Показано, что невозмущенный электрическим полем закон дисперсии электрона в магнитной подзоне обладает симметрией поворотной оси четвертого порядка, а распределение электронов по энергиям в подзонах в электрическом поле смещается в холловском направлении.

В слабых электрических полях на основе решения квазиклассического кинетического уравнения Больцмана в приближении одной заполненной магнитной подзоны Ландау, когда закон дисперсии

электрона в ней есть электронный гамильтониан, рассчитана вольт-амперная характеристика сверхрешетки. Учитывалось лишь упругое рассеяние носителей на примесях в приближении времени релаксации импульса.

Показано, что в скрещенных полях имеет место эффект отрицательной дифференциальной продольной проводимости, мало чувствительный к различным вкладам в спин-орбитальное взаимодействие в электронном газе. В то же время, эффекты зарядового транспорта в холловском направлении существенным образом зависят от того, какой тип спин-орбитального взаимодействия преобладает в электронном газе. Следует отметить также, что если электрическое поле будет достаточно сильным, то при расчетах вольт-амперных характеристик системы необходимо руководствоваться решением квантового кинетического уравнения, учитывать разогрев электронного газа, межминизонное туннелирование в спектре и эффекты неупругого рассеяния на фонах.

Литература

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая физика часть 2 – 8-е издание, стереот. – М.: ФИЗМАТЛИТ, 2006.
2. Зильберман Г. Е. Энергетический спектр электрона в кристалле в магнитном поле, ЖЭТФ т. 30, С. 1092 (1956).
3. Зильберман А. Е. Электрон в слабом периодическом и однородном магнитном полях, ЖЭТФ т. 23, С. 49 (1952).
4. Rauh A. Degeneracy of Landau Levels in Crystals, Phys.Stat.Sol., (b) V. 65, P. K131 (1974).
5. Hofstadter D. Energy levels and wave functions of Bloch electrons in rational and irrational magnetic fields, Phys.Rev.(B) V.14 P.2239 (1976).
6. Butler F.A., Brown E. Model Calculations of Magnetic Band Structure, Phys.Rev.(B) V. 166 P. 630 (1968).
7. Hasegawa Y., Hatsugai Y., Kohmoto M. Stabilization of flux states on two-dimensional lattices, Phys. Rev. (B) V. 41 No 13 P. 9174 (1990).
8. Келдыш Л. В. Свойства полупроводниковых сверхрешеток, ФТТ 4, 2265 (1962).
9. Павлович В. В., Эпштейн Э. М. Нелинейная высокочастотная проводимость сверхрешетки, ФТТ 18, 1483 (1976).
10. Павлович В. В., Эпштейн Э. М. Проводимость полупроводника со сверхрешеткой в сильных электрических полях, ФТП 10, 2001 (1976).
11. Ignatov A. A., Romanov Yu. A. Nonlinear Electromagnetic Properties of Semiconductors with a Superlattice, Phys. Status Solidi B 73, 327 (1976).
12. Игнатов А. А., Романов Ю. А. Абсолютная отрицательная проводимость в полупроводниках со сверхрешеткой, Изв. вузов. Радиофизика 21, 132 (1978).

13. Басс Ф. Г., Зорченко В. В., Шашора В. И. Stark-cyclotron resonance in semiconductors with a superlattice, *Письма в ЖЭТФ* 31, 345 (1980).
14. Ignatov A. A., Renk K. F., Dodin E. P. Esaki-Tsu superlattice oscillator: Josephson-like dynamics of carriers, *Phys. Rev. Lett.* 70, 1996 (1993).
15. Романов Ю. А. О дифференциальной проводимости полупроводниковых сверхрешеток, *ФТТ* 45, 529 (2003).
16. Wang X. F., Vasilopoulos P. Magnetotransport in a two-dimensional electron gas in the presence of spin-orbit interaction, *Phys. Rev. B* 67, 085313 (2003).
17. Geisel M. C., Smet J. H., Umansky V. et al. Detection of a Landau Band-Coupling-Induced Rearrangement of the Hofstadter Butterfly, *Phys. Rev. Lett.* 92, 256801 (2004).
18. Demikhovskii V. Ya., Perov A. A. Hall conductance of a two-dimensional electron gas with spin-orbit coupling in the presence of a lateral periodic potential, *Phys. Rev. B* 75, 205307 (2007).
19. Перов А. А., Пенягин И. В. Магнитные блоховские электронные состояния и спиновая поляризация в двумерных сверхрешетках без центра инверсии со спин-орбитальным взаимодействием Рашба в электронном газе, *ЖЭТФ* 145, 535 (2014).