

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ им. А.Ф. ИОФФЕ
Российской академии наук

на правах рукописи

Рожанский Игорь Владимирович

РЕЗОНАНСНО-ТУННЕЛЬНЫЕ СПИНОВЫЕ
ЯВЛЕНИЯ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ
ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ

Специальность:

01.04.10 - физика полупроводников

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени

доктора физико-математических наук

Санкт-Петербург

2016

Оглавление

Введение	6
1 Туннельные явления в твердотельных структурах	15
1.1 Метод расчета коэффициента прохождения через барьер	15
1.1.1 Прохождение частицы через потенциальный барьер	15
1.1.2 Резонансное туннелирование	16
1.1.3 Спин-зависимое туннелирование через барьер со спин- орбитальным взаимодействием	18
1.2 Метод туннельного гамильтониана	21
1.3 Пример применения метода туннельного гамильтониана. Инжекция дырок в среду с прыжковой проводимостью	30
1.3.1 Задача об инжекции дырок в органические молекулярные твердые тела	31
1.3.2 Теоретическое описание	33
1.3.3 Результаты расчётов туннельной инжекции дырок	36
1.4 Резонансная туннельная гибридизация	40
1.5 Определение сдвига энергии из фазы рассеяния	46
2 Туннелирование между двумерными слоями со спин-орбитальным взаимодействием	50

2.1	Введение	50
2.1.1	Туннелирование между двумерными слоями	50
2.1.2	Спин-орбитальное взаимодействие	51
2.1.3	Постановка задачи	52
2.2	Теория	55
2.3	Результаты расчетов. Частные случаи	63
2.3.1	Одинаковое спин-орбитальное взаимодействие в слоях	63
2.3.2	Спин-орбитальное взаимодействие Рашбы	65
2.3.3	Случай “spin helix”	66
2.3.4	Взаимодействия Рашбы и Дрессехауза в произвольном соотношении	69
2.4	Оценки и анализ существующих экспериментальных данных	71
2.4.1	Гетероструктуры AlGaAs/GaAs n-типа	71
2.4.2	Гетероструктуры AlGaAs/GaAs p-типа	74
2.4.3	Экспериментальное определение параметров спин-орбитального взаимодействия	77
2.4.4	Гетероструктуры Ge/SiGe	79
2.5	Краткие итоги	81
3	Резонансно-туннельная гибридизация и оптические свойства гетероструктур с магнитными примесями	83
3.1	Введение	83
3.2	Туннелирование между связанным состоянием и квантовой ямой	85
3.3	Влияние резонансно-туннельной гибридизации на прямые излучательные переходы	91

3.4	Оптическая поляризация фотолюминесценции при резонансно- туннельной гибридизации	96
3.5	Электростатический эффект	101
3.6	Сравнение с экспериментальными данными	104
3.7	Краткие итоги	107
4	Спин-зависимая туннельная рекомбинация в гетероструктурах	108
4.1	Введение	108
4.2	Теория спин-зависимой туннельной рекомбинации	112
4.2.1	Резонансный случай	113
4.2.2	Нерезонансный случай	116
4.2.3	Резонансный и нерезонансный вклады, зависимость от тем- пературы	119
4.3	Спин-зависимая туннельная рекомбинация в гетероструктурах (Ga,Mn)As	121
4.3.1	Расчет временной зависимости интенсивности и циркулярной поляризации	121
4.3.2	Сравнение с экспериментальными данными	123
4.3.3	Вклады динамической поляризации и поляризации равновес- ных носителей	125
4.4	Краткие итоги	126
5	Резонансное косвенное обменное взаимодействие в полупроводни- ковых гетероструктурах	128
5.1	Введение	128
5.1.1	Обменное взаимодействие	128

5.1.2	Косвенное обменное взаимодействие через свободные носители	132
5.1.3	Косвенный обмен в гетероструктурах (Ga,Mn)As	135
5.1.4	Непертурбативное вычисление косвенного обмена	138
5.2	Косвенное обменное взаимодействие магнитных центров через свободные носители	140
5.2.1	Косвенное обменное взаимодействие в одномерном случае . .	140
5.2.2	Косвенное обменное взаимодействие в двумерном случае . .	142
5.3	Резонансный косвенный обмен через пространственно отделённый проводящий канал	146
5.3.1	Резонансный косвенный обмен в двумерном случае	146
5.3.2	Резонансный косвенный обмен в одномерном случае	153
5.4	Резонансный косвенный обмен в гетероструктурах на основе InGaAs с дельта-слоем Mn	158
5.5	Краткие итоги	168

6 Резонансное косвенное обменное взаимодействие в структурах на основе графена 169

6.1	Введение	169
6.2	Общая теория косвенного обменного взаимодействия в структурах на основе графена	171
6.2.1	Эффективный гамильтониан графена в приближении ближайших соседей	171
6.2.2	Общая теория для структур на основе графена	172
6.3	Резонансный косвенный обмен в углеродных нанотрубках.	177
6.4	Резонансный косвенный обмен в графене	181
6.4.1	Введение	181

6.4.2	Метод расчета	181
6.4.3	Результаты	187
6.4.4	Модуляция магнитных свойств полем с помощью затвора . .	191
6.5	Краткие итоги	192
Заключение		194
Список литературы		199

Введение

Появление полупроводниковых гетероструктур во второй половине XX века дало толчок исследованиям новых физических явлений в полупроводниковой электронике и оптике. В частности, благодаря развитию технологии, квантовые явления в гетероструктурах и других системах пониженной размерности стали ключевой областью развития современной физики полупроводников [1]. В настоящее время полупроводниковые гетероструктуры являются важнейшей основой современных твердотельных приборов [2]. Эффекты размерного квантования в гетероструктурах связаны с пространственным ограничением движения носителя заряда в одном (квантовые ямы), двух (квантовые проволоки) или трех (квантовые точки) измерениях. Такие структуры пониженной размерности открывают пути для исследования новых физических явлений и их реализации в прикладных областях [3, 4, 5]. Кроме того, требования дальнейшей миниатюризации и повышения быстродействия полупроводниковых устройств привели к тому, что в настоящее время квантовые явления оказываются определяющими для работы современных устройств хранения и обработки информации, а также генераторов и детекторов электромагнитного излучения [6, 7, 8]. При характерных размерах полупроводниковых систем порядка нескольких нанометров размерное квантование приводит к кардинальной перестройке энергетического спектра частиц [9, 10, 11], а типичные потенциальные барьеры становятся прозрачными для туннелирования. Так, квантовое туннелирование лежит в основе работы резонансно-туннельных диодов, квантово-каскадных лазеров, флэш-памяти и других современных приборов.

В последнее время большинство исследований в области физики полупроводни-

ков сосредоточены на квантовых эффектах в низкоразмерных системах и поиске новых физических принципов, позволяющих продвинуться еще дальше в повышении быстродействия и интегрированности полупроводниковой электроники. Одним из таких направлений, активно развивающихся в настоящее время, является спинтроника - область физики полупроводников, направленная на фундаментальные исследование спин-зависимых явлений, а в прикладном аспекте – на практическое использование спиновой степени свободы электронов в приборах нанoeлектроники [12, 13]. Среди важнейших для полупроводниковой спинтроники явлений следует отметить спин-орбитальное взаимодействие, аномальный, спиновый и топологический эффекты Холла, спин-зависимый транспорт, эффекты магнетизма в полупроводниках, явления оптической поляризации и спиновой ориентации при взаимодействии магнитных моментов носителей заряда с электромагнитным излучением [14].

Сказанное выше определяет актуальность темы диссертации, посвященной исследованию класса спиновых эффектов, связанных с резонансным туннелированием. Комбинация этих двух принципиально квантовых особенностей физики твердого тела, спина и резонансного туннелирования, приводит к ряду новых явлений, представляющих фундаментальный интерес, некоторые из них, например, резонансное косвенное обменное взаимодействие, имеют и прикладной аспект для применения в приборах спинтроники в будущем.

Целью работы является теоретическое исследование новых спиновых эффектов основанных на резонансном туннелировании в полупроводниковых низкоразмерных системах.

Научная новизна и практическая значимость работы состоит в разработке теории фундаментальных физических явлений спинового характера, основанных на резонансном туннелировании в полупроводниковых гетероструктурах и системах пониженной размерности.

В диссертации предложена теория резонансно-туннельного транспорта между

двумерными системами со спин-орбитальным взаимодействием, описан механизм создания спиновой и оптической поляризации в двумерной системе с непрерывным энергетическим спектром за счет спинового расщепления пространственно отделённых локализованных состояний. описан новый вид косвенного обменного взаимодействия, основанный на резонансно-туннельной связи магнитных ионов с проводящим каналом, предложена теория спин-зависимой резонансно-туннельной рекомбинации и принцип модуляции магнитных свойств с помощью резонансной обменной связи.

Исследованные явления могут быть положены в основу методов создания или считывания определённых спиновых состояний, а также управления магнитными свойствами полупроводниковых систем, что обуславливает высокую практическую значимость исследований для прикладной спинтроники и интеграции магнетизма в полупроводниковую наноэлектронику.

На защиту выносятся следующие положения:

1. При туннелировании между двумерными проводящими слоями со спин-орбитальным взаимодействием в туннельной вольт-амперной характеристике возникают резонансы, связанные с особенностями спиновой структуры состояний в слоях.
2. Резонансная туннельная гибридизация носителей заряда в квантовой яме с локализованными состояниями в барьере приводит к циркулярной оптической поляризации фотолюминесценции из квантовой ямы во внешнем магнитном поле в отсутствие спинового расщепления двумерных состояний носителей в квантовой яме.
3. В гетероструктурах на основе разбавленных магнитных полупроводников резонансная туннельная связь магнитных примесей с проводящим каналом усиливает косвенное обменное взаимодействие между магнитными примесями и приводит к немонотонной зависимости температуры Кюри от глубины

квантовой ямы в гетероструктурах (In,Ga,Mn)As.

4. Туннельная спин-зависимая рекомбинация электронов через донорные состояния в гетероструктурах на основе InGaAs квантовой ямы с пространственно отдаленным слоем Mn приводит к сверхбыстрому гашению фотолюминесценции и нарастанию спиновой поляризации.
5. Косвенное обменное взаимодействие между магнитными атомами в структурах на основе графена значительно усиливается при попадании энергетического уровня локализованного состояния на атоме в спектр заполненных состояний графена, при этом изменение уровня Ферми в графене внешним электрическим полем вызывает значительную модуляцию магнитного взаимодействия между атомами.

Апробация работы. Результаты исследований, вошедших в диссертацию, докладывались на VIII, IX, X, XI, XII Российских конференциях по физике полупроводников (Екатеринбург, 2007; Новосибирск – Томск, 2009; Нижний Новгород, 2011; Санкт-Петербург 2013, Москва–Ершово 2015), 22 международной конференции Отделения физики твердого тела Европейского физического общества (Рим, Италия, 2008), международных симпозиумах “Наноструктуры: физика и технология” (Новосибирск, 2007, Санкт-Петербург, 2016), международном исследовательском семинаре “Основы электронных наносистем: NanoПитер 2010” (Санкт-Петербург, 2010), 28,29,31,32 международных конференциях по физике полупроводников (Вена, Австрия, 2006, Рио де Жанейро, Бразилия, 2008, Цюрих, Швейцария, 2012, Остин, США, 2014), международной конференции по наноразмерному магнетизму (Сан-Себастьян, Испания, 2013), международной конференции по электронной динамике в полупроводниках, оптоэлектронике и наноструктурах (Монпелье, Франция, 2009), международной конференции по спиновой физике, химии и технологии (Санкт-Петербург, 2015), международной конференции по электронным свойствам двумерных систем (Сёндай, Япония, 2015). были пред-

ставлены приглашенными докладами на международной зимней школе по физике полупроводников (Санкт-Петербург-Зеленогорск, 2014), Уральских международных зимних школах по физике полупроводников (Екатеринбург-Новоуральск, 2008, 2010, 2012, 2014, 2016 г), московском международном симпозиуме по магнетизму (Москва, 2014), XX симпозиуме «Нанозфизика и нанозлектроника» (Нижний Новгород, 2016). Результаты исследований обсуждались также на семинарах ФТИ им. А.Ф. Иоффе, университета Аалто, Хельсинки, Финляндия, Технологического университета Лаппеенранты, Финляндия, Калифорнийского технологического университета, Пасадена, США, Тринити колледжа, Дублин, Ирландия, Университета Тохоку, Сендай, Япония. Основное содержание диссертации опубликовано в 18 научных статьях.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из Введения, шести глав, Заключения и списка литературы. Она содержит 218 страниц текста, включая 57 рисунков и 4 таблицы. Список цитируемой литературы содержит 183 наименования.

Первая глава «Туннельные явления в твердотельных структурах» посвящена методам описания туннельных явлений и примерам их применения.

В ней приведен обзор теоретических подходов к описанию туннельных явлений и подробно рассмотрены некоторые методы, используемые в нескольких главах диссертации. Рассмотрен пример задачи о спин-зависимом туннелировании при прохождении частицы через барьер со спин-орбитальным взаимодействием. Описан метод туннельного гамильтониана для расчета скорости туннелирования квантовых частиц между двумя системами, разделёнными потенциальным барьером. В диссертации метод использован в теории туннелирования с учётом спин-орбитального взаимодействия, расчете туннельной инжекции, анализе прямых оптических переходов в системе с туннельной гибридизацией, расчёте спин-зависимой туннельной рекомбинации и теории резонансного косвенного обменного взаимодействия. Приведен пример применения метода туннельного гамильтони-

ана для расчета туннельной инжекции дырок из контакта в среде с прыжковой проводимостью.

Изложена модель Фано-Андерсона, описывающая взаимодействие дискретного энергетического уровня с континуумом состояний. Эта точно решаемая модель позволяет вычислить спектр и собственные состояния в системе с резонансной гибридизацией дискретного энергетического уровня со сплошным спектром. В диссертации модель Фано-Андерсона применена для расчёта прямых оптических переходов с сохранением волнового вектора электрона в системе с резонансной туннельной гибридизацией дискретного уровня с континуумом. Кроме того, эта модель использована для описания резонансной туннельной связи магнитных ионов с проводящим каналом в полупроводниковых гетероструктурах и системах на основе графена.

Обсуждается решение задачи рассеяния на двухцентровом потенциале для расчёта энергии взаимодействия между центрами. Этот метод успешно использован в диссертации для вычисления энергии косвенного обменного взаимодействия в случае, когда теория возмущений оказывается неприменимой.

Во второй главе “Туннелирование между двумерными слоями со спин-орбитальным взаимодействием” развита теория резонансно-туннельного транспорта между двумерными системами со спин-орбитальным взаимодействием Рашбы и Дрессельхауза. Представлены результаты теоретических расчетов для туннелирования электронов и дырок между двумя квантовыми ямами, разделёнными туннельно-прозрачным потенциальным барьером в полупроводниковых гетероструктурах на основе AlGaAs/GaAs, а также для туннелирования дырок в гетероструктурах на основе SiGe с напряжёнными квантовыми ямами на основе Ge.

В главе 3 “Резонансно-туннельная гибридизация и оптические свойства гетероструктур с магнитными примесями” предложен новый механизм возникновения спиновой и оптической поляризации при резонансно-туннельной гибридизации свободных носителей в двумерном проводящем канале с локализованным

состоянием на магнитной примеси. Разработана теория резонансной туннельной гибридизации примесного состояния и континуумом двумерных делокализованных состояний в квантовой яме в полупроводниковых гетероструктурах. Проанализировано влияние гибридизации на прямые оптические переходы в квантовой яме. Показано, что гибридизация приводит к провалу в спектральной плотности фотолюминесценции вблизи энергии примесного состояния. Благодаря этому явлению спиновое расщепление примесного состояния в магнитном или эффективном обменном поле приводит к циркулярной поляризации фотолюминесценции из квантовой ямы.

В **главе 4** “Спин-зависимая туннельная рекомбинация в гетероструктурах” рассматривается кинетика неравновесного спина, связанная с резонансным туннелированием в полупроводниковых гетероструктурах. Физическое явление, рассматриваемое в данной главе заключается в возникновении спиновой поляризации электронов или дырок в квантовых ямах или квантовых точках за счет спин-зависимого ухода носителей вследствие туннелирования. При этом, из-за разных скоростей ухода носителей с противоположными проекциями спина, в изначально неполяризованном по спину ансамбле электронов или дырок возникает спиновая поляризация. Эта поляризация, в свою очередь, легко детектируется оптическими методами, например, при излучательной рекомбинации носителей в квантовой яме или квантовой точке. Характерные времена ухода могут быть очень малыми, в том числе значительно меньше времени излучательной рекомбинации, поэтому временная динамика наблюдаемых оптических свойств будет сверхбыстрой, т.е. с характерным временем меньшим, чем время излучательной рекомбинации. В диссертации изложена теория, описывающая спин-зависимую рекомбинацию и проведено сравнение с экспериментом.

В **главе 5** “Резонансное косвенное обменное взаимодействие в полупроводниковых гетероструктурах” описано новое физическое явление – усиление косвенного обменного взаимодействия за счет резонансного туннелирования. Предложена

теория резонансного косвенного обменного взаимодействия в гетероструктурах. Теория описывает косвенное обменное взаимодействие магнитных ионов через проводящий канал, отделённый потенциальным барьером. Физический принцип взаимодействия аналогичен взаимодействию Рудермана-Киттеля-Касуя-Йосиды (РККИ), ключевое отличие предложенной теории заключается в учете резонансной гибридизации связанного состояния на примеси с проводящим каналом. Разработан теоретический подход, не использующий теорию возмущений РККИ и, поэтому, применимый для описания резонансных явлений. Показано, что резонансный косвенный обмен приводит к усилению ферромагнитного взаимодействия. Теория успешно применена для объяснения немонотонной зависимости температуры Кюри от глубины квантовой ямы в гетероструктурах на основе InGaAs с пространственно отделённым слоем Mn.

В **главе 6** “Резонансное косвенное обменное взаимодействие в структурах на основе графена” теория резонансного косвенного обмена применена для структур на основе графена. Рассматривается графен или углеродная нанотрубка с нанесёнными на поверхность магнитными адатомами, причем поверхностная концентрация адатомов такова, что прямого обменного взаимодействия между ними нет. Однако, адатомы связаны с электронами в графене, которые могут обеспечивать косвенное обменное взаимодействие между адатомами. Показано, что косвенное обменное взаимодействие между магнитными адатомами в структурах на основе графена значительно усиливается при попадании энергетического уровня локализованного состояния на адатоме в спектр заполненных состояний графена. Одним из наиболее интересных результатов является то, что в случае резонансного косвенного обмена в графене характер магнитного взаимодействия (антиферромагнитное или ферромагнитное) зависит только от энергии локализованного состояния на адатоме, но не зависит от расположения адатомов на поверхности графена. Таким образом, даже для случайного расположения адатомов имеется определенное магнитное взаимодействие. Изменение уровня Ферми носителей электриче-

ским полем затвора приводит к значительной модуляции силы взаимодействия, что открывает возможности для простого управления магнитными свойствами такой системы.

Формулы и рисунки диссертации нумеруются по главам, нумерация литературы единая для всего текста.

Глава 1

Туннельные явления в твёрдых телах

Туннельный эффект является одним из самых ярких явлений в квантовой механике. Туннелирование представляет собой процесс прохождения частицы через классически недоступные области, в которых ее кинетическая энергия отрицательна [15]. Туннельные эффекты лежат в основе работы многих полупроводниковых приборов [16]. Классическими яркими примерами использования туннельного эффекта в современных приборах являются туннельные диоды [17, 16], квантово-каскадные лазеры [18, 19], флеш-память [20], устройства магнитного хранения информации на основе туннельного магниторезистивного эффекта [21, 22], в SQUID магнетометрах, использующих эффект Джозефсона [23, 24], современных и перспективных одноэлектронных приборах [25], наконец, обычный омический контакт металла к полупроводнику часто является туннельным [16].

1.1 Метод расчета коэффициента прохождения через барьер

1.1.1 Прохождение частицы через потенциальный барьер

Простейшей задачей о туннелировании является вычисление коэффициента прохождения частицы через потенциальный барьер, превосходящий по высоте энергию налетающей частицы (Рис. 1.1). Задача решается с помощью стационарного

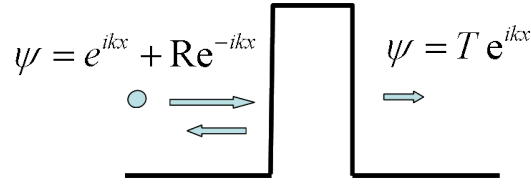


Рис. 1.1: Иллюстрация простейшей задачи о туннелировании частицы через потенциальный барьер. R, T - амплитуды отраженной и прошедшей волны, k - волновое число

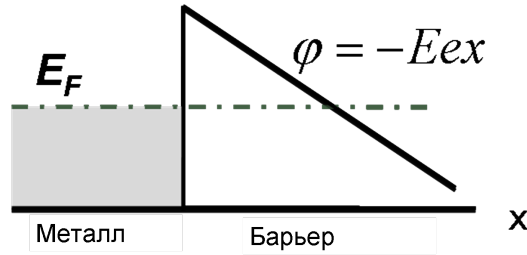


Рис. 1.2: Иллюстрация явления автоэлектронной эмиссии.

уравнения Шредингера с учетом заданной асимптотики решений (только прошедшая волна за барьером) [15]. Такая формулировка является задачей рассеяния, вероятность туннелирования определяется отношением потока частиц после барьера к потоку частиц, падающих на барьер. Примером физического явления, описываемого таким образом является автоэлектронная эмиссия - испускание электронов проводящими твёрдыми телами под действием внешнего электрического поля. Потенциальный барьер $\varphi(x)$ на границе металла и вакуума при приложении внешнего электрического поля E приобретает треугольную форму, таким образом становится возможным туннелирование электронов с энергией Ферми в металле E_F в вакуум (1.2). Ток электронов определяется коэффициентом прохождения через треугольный потенциальный барьер [26].

1.1.2 Резонансное туннелирование

Если область, в которую или из которой может происходить туннельный переход электрона, является квантово-размерной (квантовая яма, квантовая проволока, квантовая точка), возможно явление резонансного туннелирования. Примером одномерной задачи о резонансном туннелировании является прохождение частицы

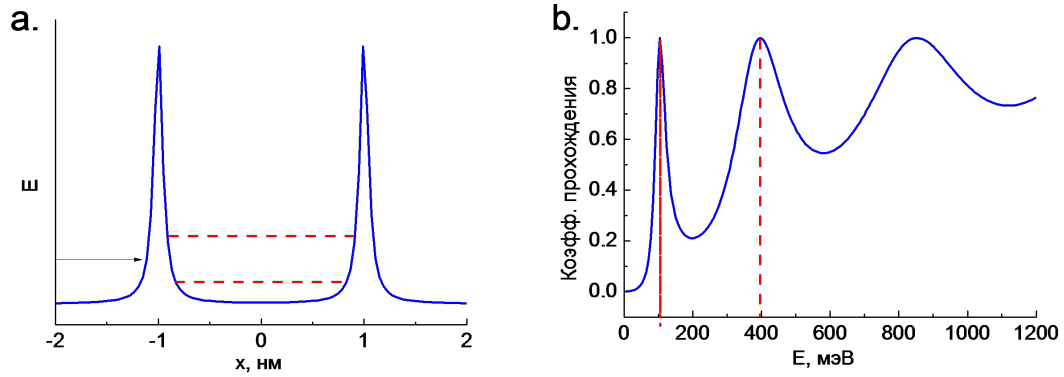


Рис. 1.3: (a) - Иллюстрация задачи о прохождении частицы через два дельта барьера. Красные линии - квазиуровни размерного квантования в области между барьерами.(b) - пример зависимости коэффициента прохождения от энергии налетающей частицы.

через два дельта-барьера (Рис. 1.3,а). Область между двумя барьерами является ограниченной и если барьеры имеют слабую туннельную прозрачность, то можно говорить о дискретных энергетических уровнях размерного квантования в этой области. В случае, если энергия частицы, налетающей на барьер слева совпадает с одним из уровней размерного квантования, возникает резкое увеличение коэффициента прохождения через всю структуру до единицы [27] (Рис. 1.3,б). В более широком смысле под резонансным туннелированием будем понимать явление резкого возрастания электрического тока сквозь туннельный переход или резкое усиление туннельной гибридизации состояний при совпадении энергетических уровней электронов с обеих сторон от туннельного перехода. Классическим примером использования явления резонансного туннелирования в прикладной области является резонансно-туннельный диод [28]. При определенном напряжении, приложенном к полупроводниковой гетероструктуре энергия налетающей частицы совпадает с энергией уровня размерного квантования в области между двумя потенциальными барьерами сформированными более широкозонным полупроводником, при этом возникает увеличение тока за счет резонансного туннелирования.

Резонансная туннельная связь, в основе которой лежит совпадение энергетиче-

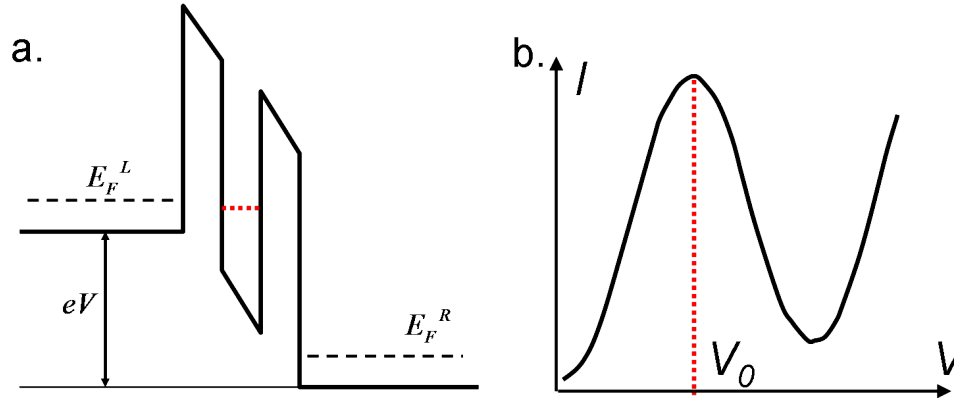


Рис. 1.4: (а) - профиль потенциала в двухбарьерной гетероструктуре при приложенном напряжении V . $E_F^{L,R}$ - квазиуровни Ферми слева и справа от барьеров. (b) - характерная форма вольт-амперной характеристики резонансно-туннельного диода. При определенном напряжении V_0 имеется максимум, отвечающий резонансному туннелированию через двойной барьер.

ческих уровней подсистем с разных сторон от туннельного перехода может нетривиальным образом сказываться на свойствах системы, связанных со спином частиц. Именно такие явления, связанные с влиянием резонансно-туннельной связи на спиновые свойства исследуются в диссертации. Эти новые туннельно-спиновые эффекты открывают возможности для использования, в том числе и в прикладной области.

1.1.3 Спин-зависимое туннелирование через барьер со спин-орбитальным взаимодействием

Рассмотрим пример задачи о спин-зависимом туннелировании, решаемой простейшим методом расчета коэффициента прохождения через барьер. Впервые эта задача была рассмотрена в работе [29]. Рассмотрим полупроводниковую гетероструктуру на основе AlInGaAs (или AlInGaSb). Кристаллическая решетка этих полупроводников не обладает центром инверсии и в них имеется спин-орбитальное взаимодействие Дрессельхауза. Движение электрона с волновым вектором $\mathbf{k} = (\mathbf{k}_{\parallel}, k_z)$ в такой гетероструктуре, вырощенной в направлении z описывается гамильтони-

аном [30]

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m} + V(z) + \gamma (\hat{\sigma}_x k_x - \hat{\sigma}_y k_y) \frac{\partial^2}{\partial z^2}, \quad (1.1)$$

где $\hat{\sigma}_\alpha$ - матрицы Паули, γ - параметр материала, m - эффективная масса электрона (считается одинаковой во всех слоях гетероструктуры), оси координат x, y, z совпадают с кристаллографическими осями $[100], [010], [001]$, соответственно. Гамильтониан (1.1) можно упростить к следующему виду

$$H_{\pm} = -\frac{\hbar^2}{2m_{\pm}} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m} + V(z), \quad m_{\pm} = m \left(1 \pm 2 \frac{\gamma m k_{\parallel}}{\hbar^2} \right) \quad (1.2)$$

где \pm обозначает спиновые состояния с противоположными проекциями спина на ось z , таким образом эффективная масса в направлении z имеет различные значения для противоположных ориентаций спина. В случае простого прямоугольного барьера это приводит к различным коэффициентам прохождения t_+, t_- для соответствующих спиновых состояний. Необходимым условием является отличное от нуля среднее значение компоненты волнового вектора в плоскости (xy) k_{\parallel} , например, вследствие приложенного внешнего электрического поля. Поляризация прошедших через барьер носителей, определяемая как поток спина отнесенный к полному потоку прошедших частиц дается выражением

$$P = \frac{J_S}{J} = \frac{\int_0^{\infty} f_1(\mathbf{k}) (|t_+|^2 \mathbf{s}_+ + |t_-|^2 \mathbf{s}_-) v_z d\mathbf{k}}{\int_0^{\infty} f_0(E) (|t_+|^2 + |t_-|^2) v_z d\mathbf{k}}, \quad (1.3)$$

где $\mathbf{v} = \hbar \mathbf{k} / m$ - скорость электрона, E - энергия электрона, $f_0(E)$ - равновесная функция распределения электронов, $f_1(\mathbf{k})$ - поправка к функции распределения, связанная с внешним электрическим полем в рамках приближения времени релаксации. На Рис. 1.6,а приведен пример расчета спиновой поляризации при туннелировании через одиночный барьер заданной толщины (штриховая кривая).

Значительно большую поляризацию можно получить, если вместо одиночного барьера рассматривать резонансное туннелирование через двухбарьерную гетероструктуру [30]. Как схематически показано на Рис. 1.5, различные эффективные

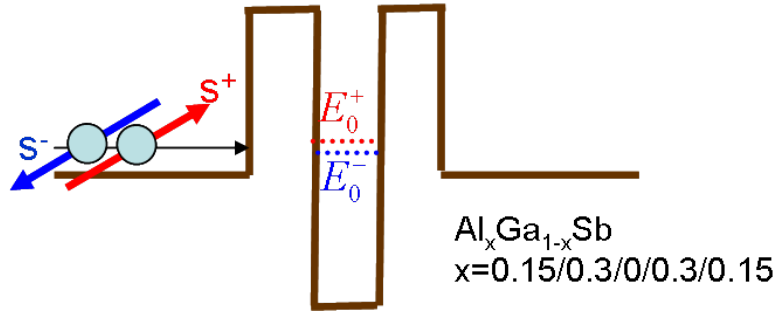


Рис. 1.5: Схема спин-зависимого туннелирования через двухбарьерную гетероструктуру.

значения массы для противоположных проекций спина приводят к разному положению квазиуровней размерного квантования в квантовой яме в середине двухбарьерной структуры, соответственно условия резонансного прохождения через гетероструктуру оказываются различными для разных спиновых состояний и это приводит к спиновой поляризации близкой к 100 % [30]. Пример такого расчета для параметров гетероструктуры [30] приведен на Рис. 1.6,b (штриховая линия).

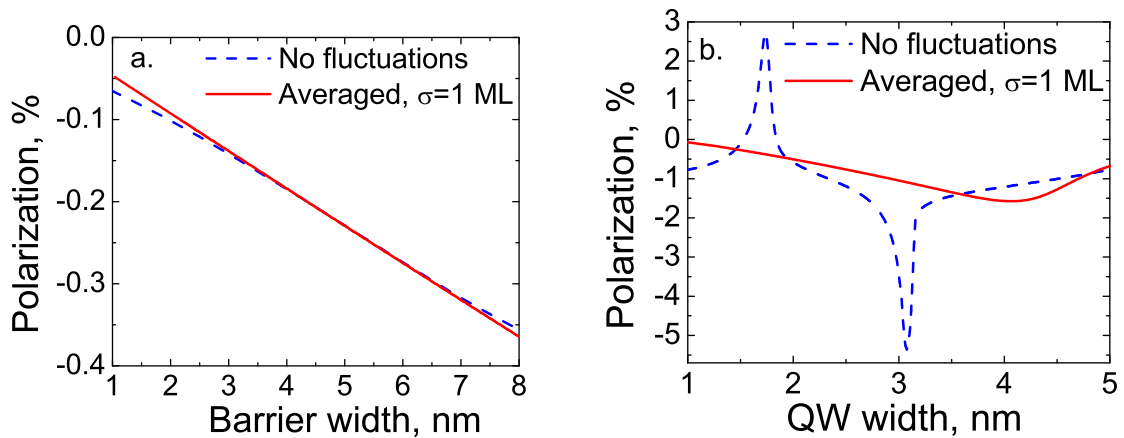


Рис. 1.6: Спиновая поляризация в однобарьерной (a.) и двухбарьерной (b.) структуре с учетом флуктуаций толщины гетерослоев

В действительности, однако, преимущества двухбарьерной гетероструктуры оказываются незначительны. Из-за резонансного характера туннелирования по-

ляризация в случае двухбарьерной структуры оказывается чрезвычайно чувствительна к толщине квантовой ямы. Считая, что эта толщина w имеет некоторое статистическое распределение $\rho(w)$, вычислим степень спиновой поляризации (1.3) усредняя спиновый и полный поток

$$\langle P \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \rho(w) J_s(w) dw}{\int_{-\infty}^{\infty} \rho(w) J(w) dw} \quad (1.4)$$

Для нормального распределения толщины квантовой ямы с дисперсией σ , равной одному монослою (≈ 0.6 нм для рассматриваемого материала), спиновые поляризации для однобарьерной и двухбарьерной структур приведены на Рис. 1.6,а,b (сплошные линии) Видно, что с учетом технологически неизбежных флуктуаций толщины квантовой ямы в один монослой преимущество резонансного туннелирования через двухбарьерную структуру значительно подавляется, в то время как туннелирование через одиночный барьер нечувствительно к флуктуациям. Для полного коэффициента прохождения через структуру $t \approx 10^{-3}$ спиновые поляризации в однобарьерной и двухбарьерной структурах оказываются $P_{SB} \approx 0.5\%$ и $P_{DB} \approx 1\%$, соответственно [A1].

1.2 Метод туннельного гамильтониана

Подход, основанный на вычислении коэффициента прохождения частицы через потенциальный барьер оказывается неэффективным, если рассматривать задачу о слабом туннелировании между двумя системами многих частиц. Заселенность конечных состояний, а также плотность состояний за барьером не входит в выражение для коэффициента прохождения, вычисляемого в одночастичной задаче рассеяния. С другой стороны, в действительности при туннелировании наличие свободных состояний за барьером играет важную роль.

Дж. Бардиным был предложен метод, позволяющий относительно просто учесть структуру состояний по обе стороны от туннельного барьера, известный

как метод туннельного гамильтониана [31, 32]. Этот метод оказался весьма эффективным при решении различных задач, связанных с туннелированием [33], в частности, в теории сканирующей туннельной микроскопии [34], при описании туннелирования между сверхпроводником и нормальным металлом [35], процессов неупругого туннелирования при взаимодействии электронов с колебательными модами молекул в барьере [36, 37], при описании эффекта Джозефсона [23] и множества других. В диссертации с помощью метода туннельного гамильтониана развито теоретическое описание ряда резонансно-туннельных спиновых явлений. В §1.3.1 настоящей главы также рассмотрен случай (не связанный со спином), когда заполнение конечных состояний за туннельным барьером определяет зависимость туннельного тока от приложенного к системе напряжения.

Основная идея метода туннельного гамильтониана заключается в представлении гамильтониана в виде суммы трех частей:

$$\hat{H} = \hat{H}_0^L + \hat{H}_0^R + \hat{H}_T, \quad (1.5)$$

где \hat{H}_L и \hat{H}_R – частные “левый” и “правый” гамильтонианы, описывающие системы с разных сторон от потенциального барьера. Строго говоря (1.5) не является истинным гамильтонианом системы с туннельной связью, он является формальной комбинацией гамильтонианов, независимо описывающих левую и правую систему и туннельного члена H_T , который описывает туннельный перенос электронов между двумя системами согласовано с теорией возмущений. Пусть профиль потенциального барьер описывается функцией $U(z)$, такой что

$$U(z) = \begin{cases} 0, & z < -a \\ U_0(z), & -a < z < a \\ 0, & z > a \end{cases} \quad (1.6)$$

Левый и правый гамильтонианы, соответственно, содержат следующие потенциальные члены:

$$U_L(z) = \begin{cases} 0, & z < -a \\ U_0(z), & -a < z < a \\ U_0(a), & z > a \end{cases} \quad (1.7)$$

$$U_R(z) = \begin{cases} U_0(-a), z < -a \\ U_0(z), -a < z < a \\ 0, z > a \end{cases} . \quad (1.8)$$

Не умаляя общности, собственные состояния \hat{H}_0^L и \hat{H}_0^R будем характеризовать волновыми числами k и q , соответственно:

$$\begin{aligned} \hat{H}_0^L |k\rangle &= E_k |k\rangle \\ \hat{H}_0^R |q\rangle &= E_q |q\rangle \end{aligned} \quad (1.9)$$

Сами состояния предполагаются ортогональными

$$\langle q|k\rangle = 0, \quad (1.10)$$

что является определенным приближением, поскольку для системы, описываемой суммой гамильтонианов $\hat{H}_0^L + \hat{H}_0^R$ с потенциалами (1.7) состояния $|k\rangle, |q\rangle$ не формируют базис. В этой связи метод туннельного гамильтониана обычно рассматривают как полуфеноменологический подход, который, однако, как свидетельствуют многочисленные случаи его применения, дает правильные результаты, а в пределах точности теории возмущений - точные результаты. Кроме того, если правая и левая системы описываются гамильтонианом сильной связи, имеющим дискретный спектр, возможна математически строгое обоснование метода туннельного гамильтониана, и проблемы ортогональности не возникает [38]. Оператор \hat{H}_T описывает туннелирование между состояниями $|k\rangle$ и $|q\rangle$ и определен через свои матричные элементы :

$$T_{kq} = \langle k| \hat{H}_T |q\rangle \quad (1.11)$$

Тогда полный гамильтониан записывается в виде:

$$\hat{H} = \sum_k E_k |k\rangle \langle k| + \sum_q E_q |q\rangle \langle q| + \sum_{kq} [T_{qk} |q\rangle \langle k| + T_{qk}^* |k\rangle \langle q|]. \quad (1.12)$$

Оператор \hat{H}_T предполагается таким, что \hat{H} совпадает с \hat{H}_0^R в области $z > -a$ и $\hat{H} = \hat{H}_0^L$ в области $z < a$. Не существует способа записать оператор взаимодействия \hat{H}_T в явном виде, но его матричные элементы (1.11) могут быть определены

с помощью стандартной теории возмущений, зависящих от времени. С учетом вышесказанного, имеем, что собственные состояния гамильтониана \hat{H} совпадают с собственными состояниями $|k\rangle$ гамильтониана \hat{H}_0^L в области $z < a$ и с состояниями $|q\rangle$ гамильтониана \hat{H}_0^R в области $z > a$. Эти состояния формируют два независимых полных набора, описывающих левые и правые состояния. Туннелирование рассматривается как переход из левого состояния $|k\rangle$ в правые состояния $|q\rangle$. Используя теорию возмущений, зависящих от времени, получаем:

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = \hat{H} |\Psi\rangle \quad (1.13)$$

$$|\Psi\rangle = |k\rangle e^{-iE_k t/\hbar} + \sum_{q'} a_{q'}(t) e^{-iE_{q'} t/\hbar} |q'\rangle, \quad (1.14)$$

где

$$a_{q'}(0) = 0, \quad |a_{q'}(t)| \ll 1$$

Подставляя (1.14) в (1.13) получим

$$\begin{aligned} & i\hbar \left[E_k |k\rangle e^{-iE_k t/\hbar} + \sum_{q'} a_{q'}(t) E_{q'} e^{-iE_{q'} t/\hbar} |q'\rangle + \sum_{q'} e^{-iE_{q'} t/\hbar} \frac{\partial}{\partial t} a_{q'}(t) |q'\rangle \right] = \\ & = \hat{H}_0^L \left[|k\rangle e^{-iE_k t/\hbar} + \sum_{q'} a_{q'}(t) e^{-iE_{q'} t/\hbar} |q'\rangle \right] + \left(\hat{H} - \hat{H}_0^L \right) \left[|k\rangle e^{-iE_k t/\hbar} + \sum_{q'} a_{q'}(t) e^{-iE_{q'} t/\hbar} |q'\rangle \right]. \end{aligned} \quad (1.15)$$

И далее:

$$i\hbar \left[\sum_{q'} e^{-iE_{q'} t/\hbar} \frac{\partial}{\partial t} a_{q'}(t) |q'\rangle \right] = \left(\hat{H} - \hat{H}_0^L \right) |k\rangle e^{-iE_k t/\hbar} + \sum_{q'} a_{q'}(t) e^{-iE_{q'} t/\hbar} \hat{H} |q'\rangle$$

Проецируя на состояние $\langle q|$ получим:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_q(t) = \langle q| \hat{H} - \hat{H}_0^L |k\rangle e^{-iE_k t/\hbar} + \sum_{q'} a_{q'}(t) e^{-iE_{q'} t/\hbar} \langle q| \hat{H} |q'\rangle. \quad (1.16)$$

В первом порядке теории возмущений последнее слагаемое в (1.16) должно быть отброшено, и тогда

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} a_q(t) = \langle q| \hat{H} - \hat{H}_0^L |k\rangle e^{-iE_k t/\hbar}.$$

Для $|a_q(t)|^2$ имеем

$$|a_q(t)|^2 = \left| \langle q | \hat{H} - \hat{H}_0^L | k \rangle \right|^2 4 \frac{\sin^2 \frac{(E_k - E_q)t}{2\hbar}}{(E_k - E_q)^2},$$

что в пределе $t \rightarrow \infty$ (предполагается, что t не слишком велико, так что $a_q(t) \ll 1$) дает:

$$|a_q(t)|^2 = \frac{2\pi}{\hbar} t \left| \langle q | \hat{H} - \hat{H}_0^L | k \rangle \right|^2 \delta(E_k - E_q).$$

Наконец, находим частоту туннелирования из золотого правила Ферми:

$$w = \frac{2\pi}{\hbar} |T_{qk}|^2 \delta(E_k - E_q), \quad (1.17)$$

где, принимая во внимание 1.10,

$$\langle q | \hat{H} - E_k | k \rangle = \langle q | \hat{H} - E_k | k \rangle - E_q \langle q | k \rangle = \langle q | \hat{H}_T | k \rangle = T_{qk}.$$

Можно переписать матричный элемент T_{qk} в более удобном виде. Пусть z_0 – произвольная точка внутри туннельного барьера: $-a < z_0 < a$. Тогда, поскольку при $z < z_0$ $\hat{H} = \hat{H}_0^L$,

$$T_{qk} = \int_{z > z_0} d\mathbf{r} \langle q | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \hat{H} - E_k | k \rangle.$$

Учитывая также, что для $z > z_0$ $\hat{H} = \hat{H}_0^R$, можно добавить слагаемое, тождественно равное нулю:

$$T_{qk} = \int_{z > z_0} d\mathbf{r} \langle q | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \hat{H}_0^R - E_k | k \rangle - \langle q | \hat{H}_0^R - E_q | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | k \rangle.$$

Из (1.17) следует, что для отличной от нуля вероятности туннелирования следует рассматривать только случай, удовлетворяющий закону сохранения энергии $E_q = E_k$:

$$T_{qk} = \int_{z > z_0} d\mathbf{r} \langle q | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \hat{H}_0^R | k \rangle - \langle \mathbf{r} | \hat{H}_0^R | q \rangle^* \langle \mathbf{r} | k \rangle$$

Операторы потенциальной энергии, входящие в \hat{H}_0^R сокращаются, остаётся только

$$T_{qk} = \int_{z > z_0} d\mathbf{r} \left[\Psi_q^*(\mathbf{r}) \hat{K} \Psi_k(\mathbf{r}) - \Psi_k(\mathbf{r}) \hat{K} \Psi_q^*(\mathbf{r}) \right], \quad (1.18)$$

где \widehat{K} – оператор кинетической энергии. Предполагая, что $\widehat{K} = -\frac{\hbar^2}{2m}$, продолжаем:

$$T_{qk} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{z>z_0} d\mathbf{r} \nabla [\Psi_q^*(\mathbf{r}) \nabla \Psi_k(\mathbf{r}) - \Psi_k(\mathbf{r}) \nabla \Psi_q^*(\mathbf{r})].$$

Применяя теорему Гаусса, приходим, в конечном итоге, к следующему выражению:

$$T_{qk} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{\Omega} d\mathbf{S} \left[\Psi_q^*(\mathbf{r}) \frac{d}{dz} \Psi_k(\mathbf{r}) - \Psi_k(\mathbf{r}) \frac{d}{dz} \Psi_q^*(\mathbf{r}) \right], \quad (1.19)$$

где интегрирование проводится по любому сечению барьера $\Omega \perp z$. Гамильтониан (1.12) удобно переписать в представлении вторичного квантования:

$$\widehat{H} = \sum_k E_k c_k^{L+} c_k^L + \sum_q E_q c_q^{R+} c_q^R + \sum_{kq} [T_{qk} c_q^{R+} c_k^L + T_{kq} c_k^{L+} c_q^R]. \quad (1.20)$$

Тогда оператор тока определяется как производная по времени оператора числа частиц, например, слева от барьера:

$$\widehat{I} = -e \frac{d\widehat{N}^L}{dt} = -\frac{ie}{\hbar} [\widehat{H}_T, \widehat{N}^L]. \quad (1.21)$$

Используя коммутационные соотношения для фермионных операторов рождения и уничтожения получаем [39, 40]:

$$\widehat{I} = \frac{ie}{\hbar} \sum_{kq} [T_{qk} c_q^{R+} c_k^L - T_{kq} c_k^{L+} c_q^R] \quad (1.22)$$

Вычисление среднего для оператора тока (1.22) производим в духе теории линейного отклика, аналогично обычному выводу формулы Кубо [39, 40]. Запишем полный гамильтониан как

$$\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{H}_T, \quad (1.23)$$

где

$$\widehat{H}_0 = \widehat{H}_0^L + \widehat{H}_0^R. \quad (1.24)$$

Рассмотрим среднее значение оператора тока как функцию времени:

$$I(t) = \langle \psi^I | \widehat{I}^I | \psi^I \rangle \quad (1.25)$$

где $|\psi^I\rangle$ - собственное состояние полного гамильтониана \hat{H} , верхний индекс I означает, что волновые функции и оператор написаны в представлении взаимодействия, т.е.

$$\hat{I}^I = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} \hat{I} e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t}, \quad |\psi^I(t)\rangle = \hat{U}(t) |\psi(0)\rangle, \quad U(t) = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}_0 t} e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}, \quad (1.26)$$

где $\hat{U}(t)$ - оператор эволюции, $|\psi(0)\rangle$ - волновая функция гамильтониана \hat{H} (при $t = 0$ - в любом представлении). Для $\hat{U}(t)$ справедливо уравнение

$$\frac{\partial}{\partial t} \hat{U}(t) = -\frac{i}{\hbar} \hat{H}_T^I \hat{U}(t),$$

имеющее формальное решение

$$\hat{U}(t) = \text{Texp} \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t \hat{H}_T^I(t') dt' \right], \quad (1.27)$$

Т означает временное упорядочение. Предполагая адиабатическое включение взаимодействия, собственное состояние полного гамильтониана $|\psi(0)\rangle$ выражается через собственное состояние $|\psi_0\rangle$ невозмущенного гамильтониана \hat{H}_0 [39]:

$$|\psi(0)\rangle = S(0, -\infty) |\psi_0\rangle = \text{Texp} \left[-\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^0 \hat{H}_T^I(t') dt' \right] |\psi_0\rangle, \quad (1.28)$$

где $S(t, t') = \hat{U}(t) \hat{U}^\dagger(t')$ - матрица рассеяния. Подставляя (1.28) и (1.27) в (1.26) и затем в (1.25) получим в наинизшем порядке по возмущению:

$$I(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t \langle \psi_0 | \left[\hat{I}^I(t), \hat{H}_T^I(t') \right] | \psi_0 \rangle dt'. \quad (1.29)$$

Подставим теперь операторы тока (1.22) и возмущения \hat{H}_T в (1.29). Для преобразования этих операторов к представлению взаимодействия понадобится явный вид оператора \hat{H}_0 (1.20). Учтем явно разность химических потенциалов левого и правого резервуара вследствие приложенного напряжения V . Введем операторы

$$\begin{aligned} \hat{K}^R &= \hat{H}^R - \mu^R \hat{N}^R \\ \hat{K}^L &= \hat{H}^L - \mu^L \hat{N}^L \\ \hat{K} &= \hat{K}^R + \hat{K}^L, \end{aligned} \quad (1.30)$$

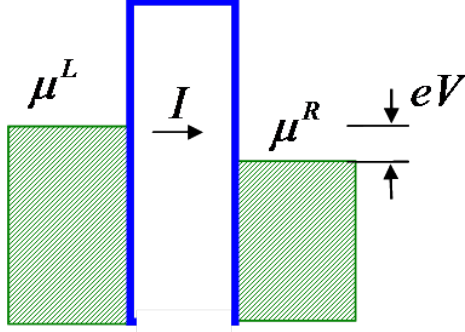


Рис. 1.7: Схема туннелирования между двумя системами.

При приложенном напряжении V имеется разность химических потенциалов слева и справа от барьера, как это показано на Рис. 1.7:

$$\mu^L - \mu^R = eV.$$

Для оператора возмущения (туннелирования) в представлении взаимодействия имеем:

$$\hat{H}_T^I = e^{\frac{i}{\hbar}H_0t} \hat{H}_T e^{-\frac{i}{\hbar}H_0t} = e^{\frac{i}{\hbar}\hat{K}t} \sum_{kq} \left[T_{qk} e^{-\frac{i}{\hbar}eVt} c_q^{R+} c_k^L + T_{kq} e^{\frac{i}{\hbar}eVt} c_k^{L+} c_q^R \right] e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{K}t}, \quad (1.31)$$

а для оператора тока

$$\hat{I}^I = \frac{ie}{\hbar} e^{\frac{i}{\hbar}\hat{K}t} \sum_{kq} \left[T_{qk} e^{-\frac{i}{\hbar}eVt} c_q^{R+} c_k^L - T_{kq} e^{\frac{i}{\hbar}eVt} c_k^{L+} c_q^R \right] e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{K}t}, \quad (1.32)$$

Введём следующую величину:

$$A(t) = \sum_{kq} T_{qk} c_q^{R+}(t) c_k^L(t), \quad (1.33)$$

где

$$c_k^L(t) = e^{\frac{i}{\hbar}K^L t} c_k^L e^{-\frac{i}{\hbar}K^L t}; \quad c_q^R(t) = e^{\frac{i}{\hbar}K^R t} c_q^R e^{-\frac{i}{\hbar}K^R t}.$$

Подставляя (1.31),(1.32) в (1.29) с учетом (1.33) получаем для среднего тока:

$$I = I_S + I_J$$

$$I_S(t) = \frac{e}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \theta(t-t') \begin{pmatrix} e^{-ieV(t-t')} \langle \psi_0 | [A(t), A^+(t')] | \psi_0 \rangle \\ -e^{ieV(t-t')} \langle \psi_0 | [A^+(t), A(t')] | \psi_0 \rangle \end{pmatrix} \quad (1.34)$$

$$I_J(t) = \frac{e}{\hbar^2} \int_{-\infty}^{\infty} dt' \theta(t-t') \begin{pmatrix} e^{-ieV(t+t')} \langle \psi_0 | [A(t), A(t')] | \psi_0 \rangle \\ -e^{-ieV(t+t')} \langle \psi_0 | [A^+(t), A^+(t')] | \psi_0 \rangle \end{pmatrix} \quad (1.35)$$

Первое слагаемое I_S описывает одночастичное туннелирование, второе I_J - осциллирующий во времени джозефсоновский ток, описывающий туннелирование куперовских между сверхпроводниками [39], в нашем случае туннелирования между нормальными металлами или полупроводниками этот вклад отсутствует. Введём запаздывающую функцию Грина \tilde{X} по отношению к величинам A :

$$\tilde{X}_{Ret} = -i\theta(t) \langle \psi_0 | [A(t)A^+(0)] | \psi_0 \rangle$$

Выражение для туннельного тока (1.34) приобретает следующий простой вид:

$$I = -2\frac{e}{\hbar^2} \text{Im} X_{Ret}(-eV),$$

где X_{Ret} - Фурье образ функции \tilde{X}_{Ret} . Полную функцию Грина X , в свою очередь, можно выразить через полные функции Грина G^L, G^R левой и правой подсистем, соответственно. Особенно простое выражение получается при туннельном параметре, слабо зависящем от энергии электрона, но обеспечивающем сохранение импульса и спина в акте туннелирования $T_{kq} = T\delta_{kq}$. В этом случае

$$\langle \psi_0 | A(t)A^+(0) | \psi_0 \rangle = T^2 \sum_k \langle \psi_0 | c_k^L(t) c_k^{L+}(0) c_k^{R+}(t) c_k^R(0) | \psi_0 \rangle.$$

Основное состояние является прямым произведением состояний левой и правой части системы $|\psi_0\rangle = |\psi_{0L}\rangle |\psi_{0R}\rangle$, а операторы c^L, c^R действуют независимо на левую и правую части основного состояния, поэтому среднее распадается на произведение функций Грина левой и правой подсистем:

$$\langle \psi_0 | A(t)A^+(0) | \psi_0 \rangle = T^2 \sum_k G^L(k, t) G^R(k, -t)$$

Проводя аналогичные преобразования со вторым слагаемым получаем:

$$\tilde{X}_{Ret} = -i\theta(t) T^2 \sum_k (G^L(k, t) G^R(k, -t) - G^{L*}(k, t) G^{R*}(k, -t)),$$

и далее

$$X_{Ret}(eV) = -iT^2 \sum_k \int d\omega' G^L(k, \omega') G^R(k, \omega' - eV)$$

Например, в случае туннелирования между двумерными слоями с электронным газом получим следующую формулу для плотности туннельного тока между левой и правой подсистемами j , выраженного через функции Грина:

$$j = \frac{eT^2}{4\pi^3\hbar^3} \text{Re} \left\{ \text{Tr} \int G^R(p, \varepsilon - eV) G^L(p, \varepsilon) d\mathbf{p}d\varepsilon \right\}, \quad (1.36)$$

где p - импульс электрона в плоскости слоев, G^R, G^L функции Грина для правой и левой подсистем без учета туннелирования. Таким образом, среднее значение тока непосредственно выражается через невозмущенные (без учета туннелирования) характеристики левой и правой систем. Это и есть ключевое преимущество метода туннельного гамильтониана - он непосредственно применим для многочастичных систем и позволяет исследовать характеристики туннельно-связанных сложных систем, при условии что известны их характеристики (функции Грина) по отдельности. Метод туннельного гамильтониана используется во всех главах диссертации.

1.3 Пример применения метода туннельного гамильтониана. Инжекция дырок в среду с прыжковой проводимостью

Рассмотрим пример применения метода туннельного гамильтониана для описания туннелирования без учета спина. Рассматриваемая задача представляет собой анализ инжекции носителей из металлического контакта в среду с прыжковой проводимостью в больших электрических полях [A3], [A4]. Задача о туннельной инжекции дырок через слабопрозрачный туннельный барьер возникает при анализе органических материалов с прыжковой проводимостью. Как будет показано

ниже, в этом примере заполнение состояний за туннельным барьером, доступных для туннелирования, нетривиальным образом определяет зависимость туннельного тока от приложенного к системе напряжения.

1.3.1 Задача об инъекции дырок в органические молекулярные твердые тела

Рассмотрим специальный случай, когда потенциальный барьер, разделяющий электроны вблизи уровня Ферми в металлическом контакте и локализованные уровни в среде с прыжковой проводимостью достаточно высок, так что термическая активация через него невозможна. В этом случае инъекция электронов из контакта или, наоборот, инъекция "дырок" (т.е. переходы электронов с заполненных энергетических уровней в среде в металлический контакт) возможны только вследствие туннелирования. Задача об инъекции дырок, лимитирующей проводимость всей системы возникает при анализе органических материалов с прыжковой проводимостью. В настоящее время органические соединения рассматриваются как перспективные материалы для микро- и оптоэлектроники. На их основе разработаны и используются светодиоды и полевые транзисторы [41]. Вследствие значительной величины энергетической щели (3 эВ и более) концентрация собственных носителей в таких материалах невысока, так что в слабых электрических полях они являются диэлектриками. Носители зарядов инжектируются из электродов под действием электрического поля, интенсивность инъекции определяется барьером, формирующимся на границе металл - диэлектрик. Для описания инжекционных (электронных и дырочных) токов j_i из металла в соответствующие зоны неорганических диэлектриков или полупроводников обычно используют уравнения, подобные уравнениям для токов полевой- и термоионной эмиссии из металла в вакуум [42]. Вместе с тем, такие уравнения без достаточных оснований часто используются и для описания инъекции носителей заряда (как электронов, так и дырок) в органические молекулярные твердые тела (ОМТТ) [43, 44, 45, 46], для которых из-за слабости межмолекулярного взаимодействия неприменимы представ-

ления зонной теории твердого тела, а проводимость носит прыжковый характер. Поэтому в последние годы большое внимание уделяется рассмотрению вопроса о туннелировании носителей заряда из металла на локальные состояния в органических материалах, для которых характерна высокая концентрация таких состояний с гауссовым распределением по энергии [47, 48, 49]. В современных приборах, например, в тонкопленочных органических светодиодах средняя напряженность действующих электрических полей близка к 10^6 V/cm. Локальная напряженность электрического поля F из-за неоднородности электродов может в несколько раз превышать эту величину. Рассмотрение области сильных полей важно также для решения проблемы электрической прочности органических материалов [50]. Полученные при рассмотрении инжекции электронов результаты обычно применяют и для описания инжекции дырок [48, 51], что является необоснованным, поскольку форма и высота барьеров при инжекции электронов и дырок различны. Особенности инжекции дырок в ОМТТ впервые обсуждались в работе [52]. В этой работе инжекция дырок рассматривалась как следствие ионизации молекул, находящихся вблизи поверхности металлического анода, за счет туннельного перехода электрона с верхней заполненной молекулярной орбитали (уровня НОМО) на свободный электронный уровень в металле. Для электронной инжекции туннельный барьер имеет форму, близкую к треугольной, эффективная высота барьера невелика и туннельная прозрачность существенно меняется при приложении внешнего электрического поля, обеспечивая сильную нелинейную зависимость инжекционного тока от приложенного напряжения (закон Фаулера – Нордгейма [26]). В отличие от инжекции электронов, для дырочной инжекции потенциальный барьер на интерфейсе металл-ОМТТ имеет трапецевидную форму. В работе [53] рассмотрена квантово-механическая задача о переходе электронов с локальных состояний в полимере в непрерывный спектр в полупроводнике или в металле. Полученное выражение для плотности дырочного инжекционного тока отличается от известного уравнения с треугольным барьером предэкспоненциальным множителем, но при-

близительно линейный характер зависимости $\log [j_i(F)F^{-2}]$ от F^{-1} (в координатах Фаулера – Нордгейма) сохраняется и в этом случае. При этом принималось, что уровень НОМО макромолекул в полимере в отсутствие электрического поля расположен вблизи уровня Ферми электрода. В этой области энергий в металле всегда имеются свободные состояния, на которые возможно изоэнергетическое туннелирование электронов с молекулярных орбиталей ОМТТ. Однако, такая ситуация не характерна для ОМТТ, в которых потенциал ионизации макромолекул превышает 6 эВ, в частности, для большинства полимерных диэлектриков. При дырочной инжекции, как правило, уровни НОМО лежат существенно ниже энергии Ферми металла (напр. [54]), поэтому эффективная высота барьера определяется энергией ионизации локализованных состояний. Прозрачность такого туннельного барьера слабо меняется даже при большой напряженности приложенного электрического поля и не объясняет наблюдаемые в эксперименте нелинейные зависимости токов инжекции от напряжения. В диссертации предложена теория, описывающая инжекцию дырок и предложен механизм, отвечающий за наблюдаемые в экспериментах нелинейные ВАХ. Этот механизм заключается в изменении скорости резонансного туннелирования не из-за формы потенциального барьера, а вследствие изменения числа свободных состояний в металле для резонансного туннелирования электронов с уровнями НОМО при изменении энергии уровней НОМО во внешнем электрическом поле.

1.3.2 Теоретическое описание

Будем полагать, что потенциальный барьер на границе металл-ОМТТ достаточно узкий и преодолевается одним прыжком электрона, при этом (в отличие от случая омического контакта) рассматривается случай малой туннельной прозрачности барьера. Для определения формы барьера необходимо учесть кулоновское взаимодействие между электроном, дыркой и их изображениями в металле. В результате, профиль потенциального барьера на границе металлический электрод - ОМТТ с учетом внешнего электрического поля F , приложенного по нормали к

контакту описывается следующей функцией [55]]:

$$U(x, x_i, F) = E_F + \varphi + exF - \frac{e^2}{16\pi\epsilon\epsilon_o x} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_o(x_i - x)} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon\epsilon_o(x_i + x)}, \quad (1.37)$$

где x_i – расстояние локализованного состояния (уровень НОМО молекулы) от анода, индекс i нумерует локализованные состояния, E_F – энергия Ферми металлического электрода, φ – работа выхода металлического электрода. Первое и второе слагаемые в (1.37) определяют высоту барьера на интерфейсе в отсутствие электрического поля, третье слагаемое учитывает влияние электрического поля на энергию заряда на расстоянии x от анода, четвертое – взаимодействие электрона с собственным изображением, пятое – энергию взаимодействия иона с электроном, шестое – взаимодействие электрона с изображением иона. При $x=0$ и $x=x_i$ это выражение обращается в $-\infty$, поэтому следует считать, что электрон с энергией E падает на барьер не в точках $x=0$ и $x = x_i$, а в точках x_1 и x_2 , являющихся корнями уравнения $E - U(x, x_i, F) = 0$. Ширина барьера в этом случае равна $(x_2 - x_1)$. На Рис. 1.8 изображен типичный профиль потенциального барьера, рассчитанная на основании соотношения (1.37). В соответствии с методом туннельного гамильтониана (см. §1.2) полный гамильтониан системы представим в виде

$$H = H_L + H_R + H_T,$$

Собственные состояния $|L\rangle$, $|R\rangle$ соответствующих “левого” и “правого” гамильтонианов имеют энергии E_L , E_R и волновые функции ψ_L , ψ_R . Туннельный матричный элемент \tilde{T} дается выражением (1.19). Плотность туннельного тока J выразим через скорость туннелирования (1.17):

$$J = e \frac{2\pi}{\hbar} V \int_0^\infty dE \int_a^\infty dx |\tilde{T}(x)|^2 Z(E) g(x, E) (1 - f(E)) f_{loc}(x, E), \quad (1.38)$$

где e – элементарный заряд, $Z(E)$ – плотность состояний в металле, $f(E)$ – распределение Ферми в металле, a – минимальное расстояние от локализованного состояния в ОМТТ до металлического электрода, $f_{loc}(x, E)$ – фактор заполнения

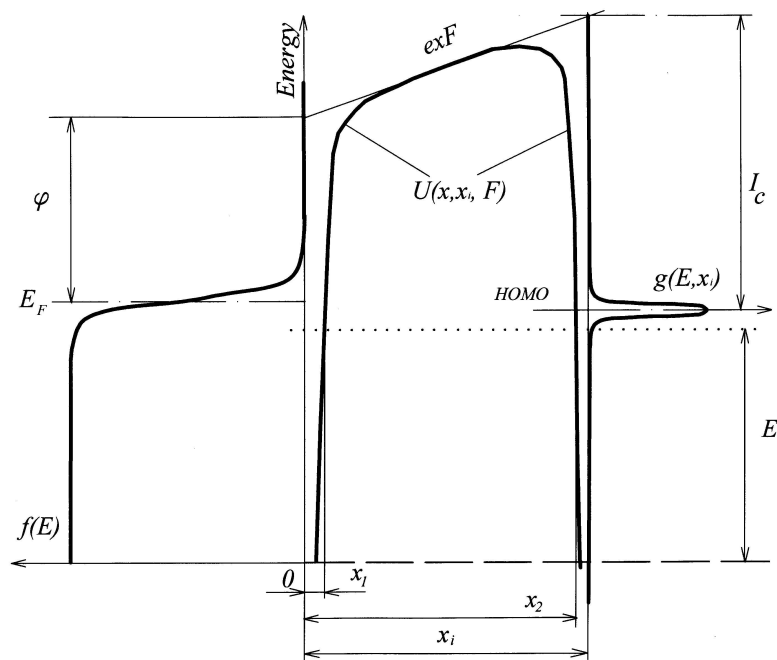


Рис. 1.8: Профиль потенциального барьера на границе металл - ОМТТ при дырочной инжекции.

локализованных состояний в органическом материале, $g(x, E)$ - плотность локализованных состояний в органическом материале.

Заметим, что когда энергии локализованных состояний в ОМТТ лежат ниже уровня Ферми в металле, прямые изоэнергетические туннельные переходы оказываются подавлены фактором $(1 - f(E))$ (1.38), иными словами, в металле может быть недостаточно свободных состояний для резонансного туннелирования электронов из ОМТТ. В этом случае важно оценить вклад непрямых туннельных процессов с участием фононов. Расчет скорости такого перехода по теории возмущений второго порядка с учетом туннельного члена и электрон-фононного взаимодействия содержит определенные технические трудности, связанные с тем, что туннельные переходы в модели туннельного гамильтониана Бардина [31] имеют место между состояниями с одной энергией и не являются настоящими квантовомеханическими переходами, рассматриваемыми теорией возмущений, зависящих

от времени. Это приводит к появлению сингулярных энергетических знаменателей во втором порядке теории возмущений. Для расчета скорости туннельных переходов с участием акустических фононов следует сначала определить спектр системы с учетом туннелирования, а затем рассмотреть электрон-фононное взаимодействие как возмущение [A4]. Роль туннелирования сводится к расщеплению собственных уровней системы металл-органическое соединение на величину \tilde{T} . Расчет скорости электронных переходов под действием фононов производится по теории возмущений первого порядка. В результате приходим в следующем выражении для плотности туннельного тока для переходов с участием акустических фононов:

$$J = V \frac{\pi^2 e \Xi^2 m^2}{s \rho \hbar^4} \int_0^\infty dE \int_a^\infty dx |\tilde{T}(x)|^2 Z(E) g(x, E) \frac{1 - f\left(E + 2s\sqrt{2mE}\right)}{e^{\frac{2s\sqrt{2mE}}{kT}} - 1} f_{loc}(x, E), \quad (1.39)$$

где Ξ – константа деформационного потенциала, определяющая эффективность взаимодействия акустических фононов с электронами, s – скорость звука в металле, ρ – плотность металла, m – масса свободного электрона, k – постоянная Больцмана, T – температура.

1.3.3 Результаты расчётов туннельной инжекции дырок

Будем рассматривать случай, когда проводимость образца ограничена контактной инжекцией, это означает, что все дырки, инжектированные в органический материал практически мгновенно достигают катода, поэтому можно считать $f_{loc}(x, E)=1$. Расчет плотности тока согласно выражениям (1.38) и (1.39) проведен путем численного интегрирования, при этом полагалось $\varepsilon=3$, $E_F=5$ эВ, $\varphi=5$ эВ. Спектр локальных состояний (уровней НОМО) предполагался гауссовым, т.е.

$$g(E, x_i) = \frac{N_{loc}}{\sqrt{2\pi}\sigma} \exp\left\{-\frac{[ex_i F + E_F + \varphi - I_C - E]^2}{2\sigma^2}\right\}, \quad (1.40)$$

где σ – дисперсия распределения, N_{loc} – концентрация локальных состояний, I_C – энергия ионизации молекул ОМТТ. Расчеты проводились для $N_{loc} = 10^{21}$ см⁻³ и $\sigma=0.1$ эВ. $E=0$ соответствует дну зоны проводимости металла. На Рис.1.9 при-

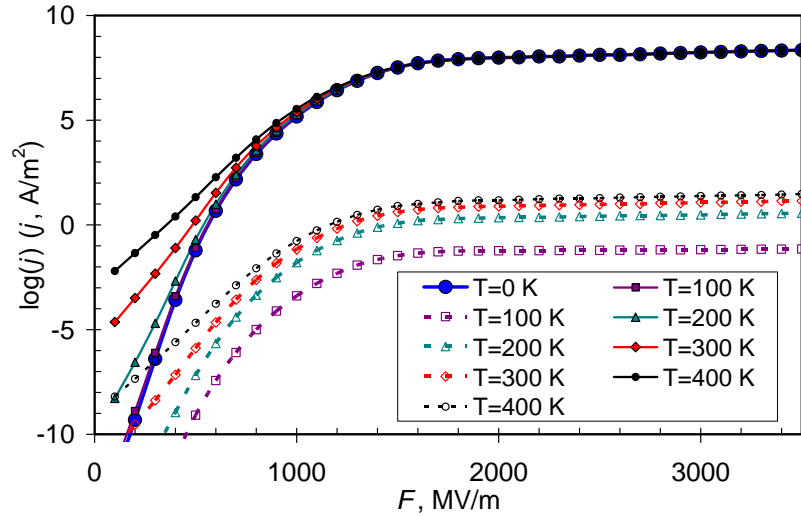


Рис. 1.9: Зависимость плотности туннельного тока от электрического поля для различных значений температуры. Сплошная линия отвечает прямым изоэнергетическим туннельным переходам, пунктирная линия – переходам с поглощением акустического фонона.

ведены рассчитанные зависимости плотности тока от электрического поля для $I_c=6$ эВ и $a=0.6$ нм при различных температурах. Сплошные линии соответствуют плотности тока, полученной по формуле (1.38), которая учитывает только резонансные изоэнергетические переходы электронов с уровнями НОМО в металл, пунктирные линии соответствуют расчету по формуле (1.39), учитывающей только переходы с поглощением фонона. Как видно, для температурного диапазона от 0 до 400 К для любой напряженности электрического поля ток прямых переходов значительно превосходит ток нерезонансных переходов с участием фононов. Этот результат позволяет сделать вывод о том, что для процессов инжекции дырок непрямыми переходами можно пренебречь и ток следует вычислять согласно выражению (1.38).

В зависимостях $j(F)$, представленных на Рис.1.9 можно выделить два характерных участка. При относительно малых полях $F \leq 1500$ МВ/м плотность тока быстро растет с полем и сильно зависит от температуры. По мере дальнейшего увеличения поля рост j замедляется, так что при больших полях ток слабо зависит от электрического поля и практически не зависит от температуры.

На Рис. 1.10 приведены зависимости $j(F)$ рассчитанные при $I_c=6.5$ эВ для различных температур и различных значений минимального расстояния между локализованных состояниями в ОМТТ и электродом a . Видно, что влияние минимального расстояния a на j также различно в различных диапазонах напряженности поля F . При данной энергии ионизации максимум плотности лока-

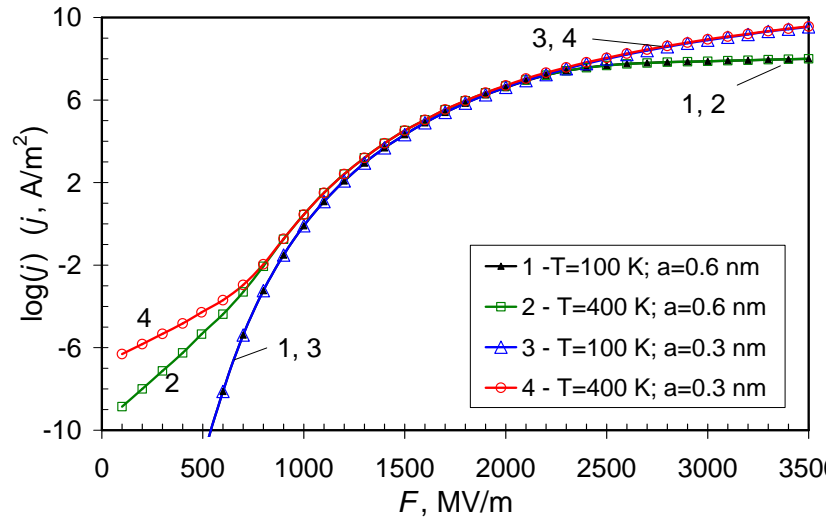


Рис. 1.10: Зависимость плотность тока от электрического поля для различных значений температуры и минимального расстояния до контакта.

лизованных состояний $g(E)$ лежит существенно ниже уровня Ферми в металле. Такая ситуация типична для многих реальных контактов, например для интерфейса LSMO/Alq₃ [54]. В этом случае при нулевой температуре в отсутствие приложенного электрического поля туннелирование из ОМТТ в металл запрещено, поскольку в металле отсутствуют свободные состояния с соответствующей энергией. При приложении электрического поля, как показано на Рис. 1.8, энергетические уровни локализованных состояний в ОМТТ сдвигаются вверх по шкале энергий, приближаясь к уровню Ферми в металле, а температура, в свою очередь, приводит к размыванию распределения Ферми. Таким образом, оба фактора способствуют появлению свободных состояний в металле с энергией, соответствующей локализованным уровням в ОМТТ вблизи контакта, поэтому становится возможными резонансно-туннельные переходы. При этом, роль минимального расстояния

a оказывается неоднозначной. В сильных электрических полях ($F > 2500$ МВ/м) электростатическая энергия всех состояний в ОМТТ достаточно велика и находится вблизи или выше уровня Ферми в аноде. Поэтому, с точки зрения энергии, туннелирование с любого из этих состояний разрешено, при этом основной вклад вносят состояния, наиболее близко расположенные к интерфейсу, в силу экспоненциальной зависимости скорости туннелирования от расстояния. Поэтому, в этом диапазоне полей ток существенным образом зависит от минимального расстояния a (кривые 3 и 4 отличаются от кривых 1 и 2 на Рис. 1.10), но не зависит от температуры (кривые 1 и 2 совпадают, как и кривые 3 и 4 на Рис. 1.10, ток прямых переходов не зависит от температуры в сильных полях на Рис. 1.9). Напротив, в более слабых полях ($F < 1500$ МВ/м) инжекционный ток зависит от температуры. При достаточно низкой температуре (кривые 1,3 соответствуют температуре $T = 100$ К) распределение Ферми в металле не обеспечивает достаточного количества свободных состояний для туннелирования из состояний ОМТТ, расположенных вблизи контакта. Однако, туннелирование возможно из состояний, расположенных дальше от интерфейса, поскольку их потенциальная энергия во внешнем поле выше и ближе к уровню Ферми металла. В этой ситуации минимальное расстояние a уже не играет роли, кривые 1 и 3 на Рис. 1.10, совпадают в слабых полях. В случае высокой температуры (представленном кривыми 2,4 для $T = 400$ К) ситуация опять меняется. Несмотря на то, что энергия локализованных состояний вблизи интерфейса по-прежнему существенно ниже уровня Ферми, туннелирование в металл разрешено из-за температурного размытия распределения Ферми и появлению большого числа свободных состояний. Минимального расстояния a опять становится важным параметром (см кривые 2,4). В промежуточном диапазоне полей $2500 > F > 1500$ МВ/м разница между представленными кривыми в данном масштабе незначительна. В этом режиме основной вклад в ток инжекции вносит туннелирование из состояний, расположенных на расстоянии превышающим a и имеющих энергию в полоске kT вблизи уровня Ферми

металла. Как зависимость от a , так и зависимость от температуры в этом режим значительно слабее.

Результаты численного моделирования позволили впервые качественно описать экспериментальные вольт-амперные характеристики для ОМТТ с дырочной проводимостью в широком диапазоне температур и электрических полей [A3]. В частности, результаты, полученные в диссертации объясняют температурную зависимость проводимости в слабых электрических полях [56], переход к полевой зависимости типа Фаулера-Нордгейма и насыщение тока в сильных полях [46, 57]. Впервые была проанализирована роль непрямых туннельных процессов с поглощением фонона [A4] и показано, что эти процессы вносят незначительный вклад по сравнению с прямыми переходами электронов с молекулярных уровней НОМО в металл.

1.4 Резонансная туннельная гибридизация

Классическим примером резонансного туннелирования является резкое возрастание туннельного тока через барьер при совпадении разрешенных уровней энергии с обеих сторон от барьера. Кроме такой постановки задачи, соответствующей подходу в рамках теории рассеяния, не менее важна и другая - задача о модификации спектра системы при наличии (резонансной) туннельной связи. Резонансная туннельная гибридизация одиночного локализованного состояния с континуумом двумерных или одномерных состояний лежит в основе ряда резонансно-туннельных спиновых явлений, рассматриваемых в диссертации. Рассмотрим эту задачу более подробно.

Первоначально задача о взаимодействии локализованного квантового состояния с континуумом делокализованных состояний была сформулирована и решена Фано [58] и Андерсоном [59] в связи с задачами атомной спектроскопии. В диссертации подобная задача рассматривается для примесного уровня в полупроводниковой гетероструктуре, отделенного потенциальным барьером от континуума

делокализованных состояний. Такая ситуация возникает, например, при рассмотрении квантовой ямы или квантовой проволоки в гетероструктуре и узкой области примесного легирования, отстоящей от квантовой ямы или проволоки на расстояние нескольких нанометров. Другим примером являются атомы примеси на поверхности двумерного материала, в диссертации рассматривается взаимодействие магнитных адатомов на поверхности графена. Наиболее важным является резонансный случай, когда энергия примесного уровня (донорного или акцепторного типа) попадает в энергетический диапазон заполненных состояний континуума (для определенности будем говорить о квантовой яме). В этом случае возможно эффективное резонансное туннелирование электронов или дырок из квантовой ямы на примесный уровень. Резонансно-туннельная связь кардинально изменяет стационарные волновые функции носителей в квантовой яме и приводит к ряду новых спиновых явлений, рассматриваемых в диссертации.

Рассмотрим локализованное примесное состояние, характеризуемое энергией ε_0 и волновой функцией ψ , волновые функции континуума обозначим $\varphi(\lambda)$, где λ – произвольное квантовое число или набор квантовых чисел, описывающих состояние. Предполагается, что состояния континуума невырождены, т.е. различные значения λ соответствуют различным энергиям $\varepsilon(\lambda)$. В рамках метода туннельного гамильтониана (см. §1.2) система может быть описана гамильтонианом вида:

$$H = \varepsilon_0 a^+ a + \int \varepsilon_\lambda c_\lambda^+ c_\lambda d\lambda + \int (t_\lambda c_\lambda^+ a + t_\lambda^* a^+ c_\lambda) d\lambda, \quad (1.41)$$

где a^+ , a – операторы рождения и уничтожения для связанного состояния, c_λ^+ , c_λ – операторы рождения и уничтожения для состояния континуума, t_λ – туннельный матричный элемент (см. §1.2). Энергия здесь и далее отсчитывается от основного уровня размерного квантования носителей в квантовой яме или проволоке, так что ε_λ – их кинетическая энергия. Выразим собственное состояние Ψ гамильтониана (1.41) через линейную комбинацию связанного состояния и состояний континуума:

$$\Psi(E) = \nu_0(E) \psi + \int \nu_\lambda(E) \varphi_\lambda d\lambda, \quad (1.42)$$

здесь E обозначает энергию состояния Ψ . В представлении вторичного квантования перейдем к полевым операторам: $\hat{\psi} = a\psi$, $\hat{\psi}^+ = a^+\psi$, $\hat{\varphi}_\lambda = c\varphi_\lambda$, $\hat{\varphi}_\lambda^+ = c^+\varphi_\lambda$. Оператор рождения частицы в гибридованном состоянии имеет вид:

$$\hat{\Psi}^+(E) = \nu_0(E)\hat{\psi}^+ + \int \nu_\lambda(E)\hat{\varphi}_\lambda^+ d\lambda. \quad (1.43)$$

Искомое гибридованное состояние является собственным состоянием гамильтониана (1.41), поэтому стационарное уравнение Шрёдингера

$$\hat{H}\hat{\Psi}^+ = E\hat{\Psi}^+$$

записывается в виде:

$$\begin{aligned} & \left[\varepsilon_0 a^+ a + \int \varepsilon_\lambda c_\lambda^+ c_\lambda d\lambda + \int (t_\lambda c_\lambda^+ a + t_\lambda^* a^+ c_\lambda) d\lambda \right] \left[\nu_0(E) a^+ + \int \nu_\lambda(E) c_\lambda^+ d\lambda \right] = \\ & = E \left[\nu_0(E) a^+ + \int \nu_\lambda(E) c_\lambda^+ d\lambda \right]. \end{aligned} \quad (1.44)$$

Проецируя его на связанное состояние $\hat{\psi}^+$ подействуем оператором \hat{a} слева и возьмем вакуумное среднее:

$$\varepsilon_0 \nu_0 + \int t_\lambda^* \nu_\lambda d\lambda = E \nu_0.$$

Проецируя на состояние континуума $\hat{\varphi}_\lambda^+$, т.е. действуя c_λ слева и беря вакуумное среднее получаем:

$$\nu_\lambda \varepsilon_\lambda + \nu_0 t_\lambda = E \nu_\lambda$$

В результате получаем следующую систему уравнений:

$$\begin{aligned} \nu_0(E) \varepsilon_0 + \int t_\lambda^* \nu_\lambda(E) d\lambda &= E \nu_0(E), \\ \nu_\lambda(E) \varepsilon_\lambda + t_\lambda \nu_0(E) &= E \nu_\lambda(E). \end{aligned} \quad (1.45)$$

Рассмотрим наиболее важный случай, когда энергетический уровень связанного состояния лежит в диапазоне энергий континуума: $\varepsilon_0 \gg t^2$. Для дискретного спектра ε_λ система уравнений (1.45) может быть, в принципе, непосредственно решена, выражая ν_λ из второго уравнения и подставляя в первое. Однако, для

сплошного спектра эта процедура неизбежно включает деление на ноль. Эта трудность исключается с помощью введения формального решения второго уравнения в (1.45) в виде [58]:

$$\nu_\lambda = \nu_0 \left(P \frac{t_\lambda}{E - \varepsilon} + Z(E) t_\lambda \delta(E - \varepsilon) \right), \quad (1.46)$$

где P обозначает главное значение при последующем интегрировании. Подставляя (1.46) в первое уравнение (1.45) получим (для $\nu_0 \neq 0$):

$$Z(E) = \frac{E - \varepsilon_0 - F(E)}{|t_{\lambda_E}|^2 D(E)}, \quad (1.47)$$

где

$$\begin{aligned} F(E) &= P \int \frac{|t_\lambda|^2}{E - \varepsilon} d\lambda \\ D(E) &= \int \delta(E - \varepsilon) d\lambda = \left(\frac{d\lambda}{d\varepsilon} \right)_E \end{aligned} \quad (1.48)$$

Подставляя (1.46) в разложение (1.42) получим:

$$\Psi(E) = \nu_0 \left[\psi + P \int \frac{t_\lambda}{E - \varepsilon} \phi_\lambda d\lambda + \frac{E - \varepsilon_0 - F(E)}{t_{\lambda_E}^*} \phi_{\lambda_E} \right].$$

Коэффициент ν_0 определяется из нормировки волновой функции $\Psi(E)$. Для гибризированной волновой функции $\Psi(E)$ λ больше не является хорошим квантовым числом. Однако, удобно формально ввести параметр λ_E , который однозначно связан с энергией E . Положим для волновых функций сплошного спектра нормировку:

$$\langle \phi_\lambda | \phi_{\lambda'} \rangle = \delta(\lambda - \lambda') = \frac{1}{D(\varepsilon)} \delta(\varepsilon - \varepsilon') \quad (1.49)$$

Введем такую же нормировку для гибризированных функций:

$$\langle \Psi(E) | \Psi(E') \rangle = \frac{\delta(E - E')}{D(E)}. \quad (1.50)$$

Волновая функция связанного состояния нормирована на 1:

$$\langle \psi | \psi \rangle = 1$$

Имеем следующее условие нормировки:

$$\langle \Psi(E) | \Psi(E') \rangle = |\nu_0(E)|^2 \left[\begin{array}{l} 1 + P \int \frac{1}{E - \varepsilon} \frac{1}{E' - \varepsilon} |t_\lambda|^2 D(\varepsilon) d\varepsilon + \\ P \int \frac{t_\lambda^*}{E - \varepsilon} \delta(\varepsilon - E') \frac{E' - \varepsilon_0 - F(E')}{t_{\lambda_{E'}}^*} d\varepsilon + \\ P \int \frac{t_\lambda}{E' - \varepsilon} \delta(\varepsilon - E) \frac{E - \varepsilon_0 - F(E)}{t_{\lambda_E}} d\varepsilon \\ + \frac{[E - \varepsilon_0 - F(E)]^2}{|t_{\lambda_E}|^2 D(E)} \delta(E - E') \end{array} \right]$$

Второе слагаемое в скобках содержит двойной полюс и, поэтому, при интегрировании в смысле главного значения возникает сингулярная особенность. При интегрировании вблизи двойного полюса в смысле главного значения следует руководствоваться теоремой Пуанкаре:

$$P \int \frac{1}{E - \varepsilon} \frac{1}{E' - \varepsilon} = P \frac{1}{E - E'} \left(\frac{1}{E' - \varepsilon} - \frac{1}{E - \varepsilon} \right) + \pi^2 \delta(E - E') \delta(\varepsilon - E). \quad (1.51)$$

Применяя теорему Пуанкаре имеем:

$$\langle \Psi(E) | \Psi(E') \rangle = |\nu_0(E)|^2 \left[\begin{array}{l} 1 + \frac{1}{E - E'} P \int \left[\left(\frac{1}{E' - \varepsilon} - \frac{1}{E - \varepsilon} \right) |t_\lambda|^2 D(\varepsilon) d\varepsilon \right. \\ \left. + \pi^2 |t_{\lambda_E}|^2 D(E) \delta(E - E') \right] \\ \frac{E' - E}{E - E'} + \frac{F(E) - F(E')}{E - E'} + \frac{[E - \varepsilon_0 - F(E)]^2}{|t_{\lambda_E}|^2 D(E)} \delta(E - E') \end{array} \right]$$

Первый член в скобках (единица) в точности сокращается с четвертым, а второй с пятым ввиду (1.48):

$$\langle \Psi(E) | \Psi(E') \rangle = |\nu_0(E)|^2 \left[\frac{\pi^2 |t_{\lambda_E}|^4 D^2(E) + [E - \varepsilon_0 - F(E)]^2}{|t_{\lambda_E}|^2} \right] \frac{\delta(E - E')}{D(E)}.$$

В конечном итоге, нормировка (1.50) выносится в качестве общего множителя и в итоге получаем:

$$|\nu_0(E)|^2 = \frac{|t_{\lambda_E}|^2}{\pi^2 |t_{\lambda_E}|^4 D^2(E) + (E - \tilde{\varepsilon}_0)^2}, \quad (1.52)$$

где

$$\tilde{\varepsilon}_0 = \varepsilon_0 + F(E).$$

Решение (1.52) имеет резонанс с центром, несколько смещённым относительно ε_0 .

Таким образом, связанное состояние оказывается “размытым” за счет взаимодействия с континуумом, все состояния становятся делокализованными с нормировкой (1.50). Тот же результат можно получить и несколько иным способом, вычисляя функцию Грина локализованного состояния с учетом гибридизации [39].

Проанализируем более подробно часть волновой функции, относящуюся к состояниям сплошного спектра. Из (1.42) и (1.46) получаем:

$$\Phi(E) = \int \nu_\lambda \phi_\lambda d\lambda = \nu_0 \int t_\lambda \phi_\lambda \left(P \frac{1}{E - \varepsilon} + Z(E) D(E) \delta(\lambda - \lambda_E) \right) d\lambda.$$

Рассмотрим волновую функцию сплошного спектра в виде $\varphi_k^{\cos} = A \cos(kx)$, $k > 0$, волновое число k нумерует состояния сплошного спектра, полагаем квадратичный закон дисперсии $\varepsilon = \alpha k^2$. Пусть туннельный параметр является плавной функцией k . Для исключения главного значения применим теорему Сохоцкого:

$$P \frac{f(x)}{x} = \frac{f(x)}{x + i\delta} + i\pi f(x) \delta(x),$$

тогда для части, содержащей главное значение:

$$\int P \frac{\cos kx}{k^2 - k_E^2} dk = \frac{1}{4k_E} \int dk \left[\frac{e^{ikx} + e^{-ikx}}{k - k_E + i\delta} - \frac{e^{ikx} + e^{-ikx}}{k + k_E + i\delta} + 2i\pi \cos k_E x [\delta(k - k_E) - \delta(k + k_E)] \right]$$

и

$$\frac{1}{\alpha} \int_0^\infty P \frac{\cos kx}{k_E^2 - k^2} dk = \frac{\pi \sin(k_E x) \text{sign}(x)}{2\alpha k_E}.$$

Таким образом, приходим к следующему выражению:

$$\Phi^{\cos}(E) = \nu_0 t_k a A \left[Z(E) D(E) \cos(k_E x) + \frac{\pi \sin(k_E x) \text{sign}(x)}{2\alpha k_E} \right].$$

После подстановки (1.52) получаем:

$$\Phi^{\cos}(E) = A \cos(k_E x + \Delta^{\cos} \text{sign}(x)), \quad (1.53)$$

где

$$\Delta^{\cos} = -\arctan \frac{\pi |t_{k_E}^{\cos}|^2}{2\alpha k_E (E - \tilde{\varepsilon}_0)}. \quad (1.54)$$

Аналогично для волновых функций сплошного спектра $\varphi_k^{\text{sin}} = A \sin(kx)$ получаем:

$$\Phi^{\text{sin}}(E) = A \sin(k_E x + \Delta^{\text{sin}} \text{sign}(x)), \quad (1.55)$$

где

$$\Delta^{\text{sin}} = -\arctan \frac{\pi |t_{k_E}^{\text{sin}}|^2}{2\alpha k_E (E - \tilde{\varepsilon}_0)}. \quad (1.56)$$

Наличие функции $\text{sign}(x)$ существенно, оно обеспечивает правильную четность волновой функции. В одномерном случае взаимодействия континуума с примесным уровнем, локализованным вблизи $x = 0$, полный набор волновых функций континуума включает φ_k^{cos} и φ_k^{sin} , однако взаимодействие с примесью практически не меняет функцию φ_k^{sin} . Дело в том, что соответствующий туннельный параметр $t_k^{\text{sin}} \approx 0$ из-за пренебрежимо малого перекрытия данной волновой функции континуума с локализованным состоянием.

Как следует из (1.53), рассеяние делокализованной частицы на локализованном состоянии приводит к появлению фазы рассеяния в волновой функции (1.54), эта фаза резко меняет знак при прохождении энергии налетающей частицы через резонансное значение $\tilde{\varepsilon}_0$. Таким образом, с точки зрения волновых функций континуума резонансно-туннельная гибридизация с локализованным состоянием аналогична резонансному рассеянию. Описанный выше метод применяется в диссертации при анализе туннельной гибридизации для расчета оптических и магнитных спин-зависимых явлений с учетом резонансной туннельной связи локализованных состояний с континуумом.

1.5 Определение сдвига энергии из фазы рассеяния

Формулировка задачи о туннельной гибридизации в терминах фазы рассеяния, приведенная в §1.4 позволяет вычислить поправку к энергии стационарной системы, связанную с этой гибридизацией. Для этого следует рассмотреть стоячую волну в ограниченной области пространства (“ящике”) и определить изменение усло-

вий квантования при появления дополнительной фазы рассеяния [60]. Рассмотрим одномерный случай и поместим систему в ящик длиной $2L$, так что $-L < x < L$, постулируем нулевые граничные условия на границе ящика. Следуя изложенному в §1.4 рассмотрим волновую функцию вида $\varphi_k = A \cos kx$, где A – нормировочная константа. С учетом туннельной гибридизации с локализованным состоянием волновая функция принимает вид (1.53):

$$\Phi(E) = A \cos(k_E x + \Delta \operatorname{sign}(x)), \quad (1.57)$$

В отсутствие туннельной связи $\Delta = 0$ имеется следующее условие квантования в ящике при $k > 0$:

$$\cos(-kL) = \cos(kL) = 0,$$

что подразумевает:

$$k_0 L = \pi n, \quad n = 1/2, 3/2, 5/2 \dots \quad (1.58)$$

Дискретный n -ый уровень энергии (как и в §1.4 полагаем $\varepsilon = \alpha k^2$):

$$\varepsilon_0 = \alpha k_0^2 = \frac{\alpha \pi^2 n^2}{L^2}, \quad (1.59)$$

и плотность состояний, соответственно, дается выражением

$$g_0(\varepsilon) = \frac{1}{L} \frac{dn}{d\varepsilon} = \frac{1}{2\pi\sqrt{\alpha\varepsilon}}. \quad (1.60)$$

Для (1.57) нулевые граничные условия удовлетворены, когда

$$\cot(kL) = \tan \Delta.$$

Используя равенство

$$\arctan x + \operatorname{arccot} x = \frac{\pi}{2} \operatorname{sign}(x),$$

имеем:

$$kL = \pi n - \Delta(k), \quad (1.61)$$

а для уровня энергии:

$$\varepsilon = \frac{\alpha}{L^2} [\pi^2 n^2 - 2\pi n \Delta + \Delta^2]$$

Далее вычисляем плотность состояний :

$$g = \frac{1}{L} \frac{dn}{d\varepsilon} = \frac{L}{\alpha} \left[2\pi^2 n - 2\pi\Delta - 2\pi n \frac{d\Delta}{dn} + 2\Delta \frac{d\Delta}{dn} \right]^{-1}$$

В термодинамическом пределе $L \rightarrow \infty$ второй и четвертый члены в скобках (содержащие дополнительный множитель n) должны быть отброшены, получаем:

$$g = g_0 + \frac{1}{\pi} \frac{1}{L} \frac{d\Delta}{d\varepsilon}, \quad (1.62)$$

где g_0 дается выражением (1.60). Подставим фазу рассеяния Δ из (1.54), при этом обозначим

$$t^2 = \frac{|t_{k_E}^{\cos}|^2}{2\alpha k_E}.$$

Тогда

$$\begin{aligned} \Delta &= -\arctan \frac{\pi t^2}{\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_0} \\ g &= g_0 + \frac{1}{\pi L} \frac{\pi t^2}{\pi^2 t^4 + (\varepsilon - \tilde{\varepsilon}_0)^2} \end{aligned} \quad (1.63)$$

Как видно из (1.63), взаимодействие с локализованным состоянием приводит к увеличению плотности состояний в форме лоренцевского пика вблизи резонансной энергии $\tilde{\varepsilon}_0$. Из (1.61) и (1.58) запишем поправку к “волновому числу”:

$$k = k_0 - \frac{\Delta}{L}. \quad (1.64)$$

Соответствующий сдвиг энергетических уровней:

$$\varepsilon = \varepsilon_0 - 2\alpha k_0 \frac{\Delta(k)}{L}, \quad (1.65)$$

где в пределе $L \rightarrow \infty$ отбрасываем слагаемое порядка $1/L^2$. Из (1.64) следует, что $k - k_0 \sim 1/L$, поэтому

$$\Delta(k) - \Delta(k_0) = \frac{d\Delta}{dk}_{k_0} (k - k_0) + \dots \sim \frac{1}{L},$$

и поэтому можно заменить $\Delta(k)$ на $\Delta(k_0)$. Для вычисления полной энергии системы следует просуммировать по всем заполненным состояниям (1.65):

$$E = E_0 - \frac{2\pi\alpha}{L^2} \sum_n n \Delta(n),$$

где E_0 – полная энергия в отсутствие туннелирования. Заменяем сумму по дискретным состояниям $n = n_0, n_0 + 1, n_0 + 2 \dots$ интегрированием по непрерывному параметру n :

$$E = E_0 - \frac{2\pi\alpha}{L^2} \int_0^N \Delta(n) n dn,$$

здесь N – номер наивысшего заселенного энергетического уровня. Выразим формально n из (1.59) и запишем:

$$E = E_0 - \frac{1}{\pi} \int_0^{E_{F0}} \Delta(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (1.66)$$

где интегрирование проводится до уровня Ферми E_{F0} , определенного как энергия наивысшего занятого состояния в отсутствие туннельной связи. При наличии туннелирования положение уровня Ферми несколько изменяется, поэтому удобнее оперировать полным числом частиц в системе, считая его одним и тем же без взаимодействия и с учетом туннельной гибридизации. Уравнение (1.66) является ключевым в теории резонансного косвенного обмена (главы 5,6 диссертации). Оно позволяет связать фазу рассеяния на двухцентровом потенциале с энергией, так что энергия косвенного обмена может быть выражена через разность фаз рассеяния для разных спиновых конфигураций магнитных ионов, что сводится к разной форме двухцентрового потенциала рассеяния.

Глава 2

Туннелирование между двумерными слоями со спин-орбитальным взаимодействием

2.1 Введение

2.1.1 Туннелирование между двумерными слоями

Туннелирование между двумерными проводящими слоями, разделенными потенциальным барьером, является ярким примером резонансного квантового явления в полупроводниковых наноструктурах. В качестве двумерных проводящих слоев будем рассматривать квантовые ямы в легированных полупроводниковых наноструктурах, с экспериментальной точки зрения наиболее разработаны структуры на основе GaAs [61], кроме того, аналогичные явления резонансного туннелирования в последнее время экспериментально изучаются в структурах, где в качестве двумерного слоя выступает графен [62]. При туннелировании между одинаковыми двумерными слоями (квантовыми ямами), движение в направлении z , перпендикулярном плоскости барьера квантовано, т.е. вместо непрерывного спектра значений импульса p_z имеются дискретные уровни размерного квантования. Это приводит к тому, что, в отличие от туннельных явлений в объемных образцах, сохранение энергии и сохранение импульса в плоскости квантовых ям при туннелировании накладывают жесткие ограничения, так что проводимость в на-

правления, перпендикулярном плоскости слоев, имеет резонансный максимум при нулевом смещении, однородно уширенный в меру рассеяния носителей [63] и/или неоднородно уширенный из-за флуктуаций толщины слоев [64]. Такое поведение туннельной проводимости наблюдалось в ряде экспериментов [61, 65, 66]. Эта резонансная особенность оказывается очень чувствительной к структуре спектра двумерных носителей, в частности к спин-орбитальному взаимодействию в слоях.

2.1.2 Спин-орбитальное взаимодействие

В атомной физике спин-орбитальное взаимодействие возникает в качестве релятивистской поправки при разложении уравнения Дирака во внешнем поле по степеням v/c [67]. При движении электрона в центральном потенциале ядра $U(r)$ в гамильтониане возникает слагаемое

$$H_{SO} = \frac{\hbar^2}{2m^2c^2r} \frac{dU}{dr} \hat{\mathbf{I}}\hat{\mathbf{S}},$$

где $\hat{\mathbf{I}}$ - оператор орбитального момента, $\hat{\mathbf{S}}$ - оператор спина, m - масса электрона, c - скорость света. Эффект имеет классическую интерпретацию - в движущейся системе отсчета электрона электрическое поле ядра трансформируется в магнитное поле, которое взаимодействует с собственным магнитным моментом электрона [68]. Спин-орбитальное взаимодействие изменяет энергетический спектр электрона в атоме, в частности оно ответственно за тонкую структуру спектров [67]. В кристаллическом твердом теле спин-орбитальное взаимодействие также приводит к изменениям в структуре энергетических зон, в гамильтонианах возникают слагаемые, связывающие “орбитальное” движение частиц в кристаллическом электрическом поле с их спиновым моментом. Например, для состояний валентной зоны GaAs, сформированных атомными орбиталями р-типа с орбитальным моментом $l=1$ возникает спин-орбитальное расщепление по полному угловому моменту $j=3/2$, $j=1/2$.

В двумерных кристаллических системах выделяют два основных вида спин-орбитального взаимодействия – взаимодействие Рашбы и взаимодействие Дрес-

сельхауза [69]. Взаимодействие Рашбы [70, 71], характеризуемое параметром α возникает из-за структурной асимметрии (structure inversion asymmetry, SIA). В гетероструктурах пространственный профиль зон, и следовательно, внутреннее электрическое поле, асимметричны. Следствием является энергетическое расщепление электронных состояний с противоположными проекциями спина, зависящее от волнового вектора, что и называют эффектом Рашбы. Этот эффект возникает, например, в квантовой яме с наклонным профилем потенциала, т.е. при наличии электрического поля, и пропорционален напряженности поля. Второй тип спин-орбитального взаимодействия, взаимодействие Дрессельхауза [72, 73], характеризуемое параметром β , обусловлено объемной асимметрией материала (bulk inversion asymmetry, BIA), спиновое расщепление также возникает из-за кристаллического электрического поля, однако необходимая для возникновения расщепления асимметрия обусловлена самой кристаллической решеткой, а именно отсутствием в точечной группе симметрии решетки центра инверсии. В гетероструктурах с кристаллической решеткой без центра инверсии оба вклада могут быть сравнимы по величине, при этом энергетический спектр модифицируется нетривиальным образом. Экспериментальное определение параметров α , β в каждом конкретном случае является сложной задачей [74]. Соотношение между этими параметрами, в частности, определяет спиновую релаксацию [75, 76].

2.1.3 Постановка задачи

Как будет показано в настоящей главе, туннелирование между двумерными слоями оказывается чрезвычайно чувствительно к отношению вкладов Рашбы и Дрессельхауза [A2]. Задача о туннелировании электронов и дырок между двумя квантовыми ямами проиллюстрирована на Рис.2.1. В случае туннелирования электронов квантовые ямы сформированы профилем зоны проводимости. В экспериментальной работе [61] материалом в области квантовой ямы является GaAs, а барьеры сформированы твёрдым раствором $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$. С внешних сторон от системы квантовых ям расположены легирующие слои. В случае а. легирующая при-

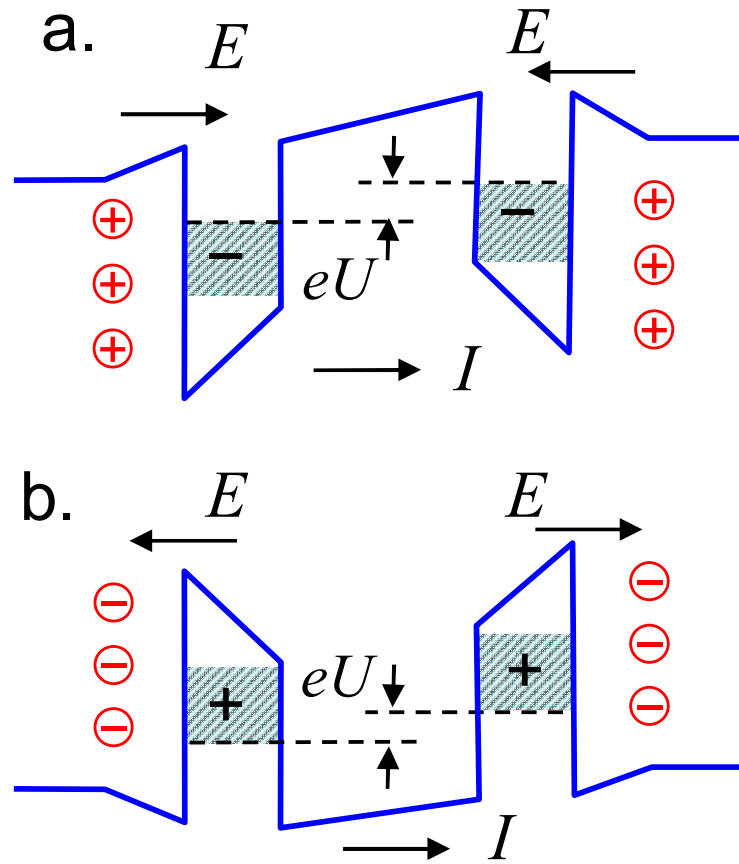


Рис. 2.1: Схема туннелирования между двумерными слоями. Случай туннелирования электронов (a) и туннелирования дырок (b).

мель донорного типа, поэтому квантовые ямы заполнены электронами (заштрихованные области). Слои ионизованных доноров имеют положительный заряд и создают электрическое поле противоположных направлений в разных квантовых ямах как показано на Рис.2.1(а). При приложении к квантовым ямам постоянного напряжения U может возникать туннельный ток I . В случае туннелирования дырок ситуация полностью аналогичная (Рис. 2.1(b)), квантовые ямы сформированы профилем края валентной зоны, а встроенное электрическое поле создается слоем отрицательно заряженных акцепторов. В отсутствие спин-орбитального взаимодействия туннелирование возможно только при нулевом смещении U . Именно такая ситуация наблюдалась экспериментально как для туннелирования электронов [61], так и для туннелирования дырок [77] - дифференциальная туннельная проводимость обнаруживает резонансный максимум при $U = 0$.

Спин-орбитальное взаимодействие в слоях приводит к расщеплению энергетических спектров на спин-орбитальные подзоны, при этом с точки зрения сохранения энергии и импульса в плоскости становится возможно туннелирование из верхней подзоны левого слоя в нижнюю подзону правого при конечном напряжении, соответствующем энергии спин-орбитального расщепления. Однако, если параметры спин-орбитального взаимодействия равны для левого и правого слоев, туннелирование запрещено из-за ортогональности спиновой части соответствующих собственных состояний. Но если взаимодействие Рашбы имеет разный знак в левом и правом слое, такое туннелирование становится возможным [78, 79]. В реальных экспериментах легирование двух-ямной структуры осуществляется таким образом, что легирующие слои расположены ниже нижней квантовой ямы и выше верхней, по направлению эпитаксиального роста, поэтому ионизованные примеси создают в двух квантовых ямах электрические поля противоположных направлений. Именно эта ситуация и отвечает разным знакам параметра Рашбы, который пропорционален электрическому полю, т.е. $\alpha^R = -\alpha^L$, где α^L и α^R - параметры Рашбы для левого и правого слоев, соответственно. В этом случае пик про-

димости возникает при конечном ненулевом смещении U_0 , отвечающем энергии спин-орбитального взаимодействия: $eU_0 = \pm 2\alpha k_F$, где k_F – волновой вектор на уровне Ферми.

Чрезвычайная чувствительность резонансных особенностей туннелирования между двумерными слоями к спин-орбитальному взаимодействию открывает возможность для определения параметров спин-орбитального взаимодействия, а также управления резонансного переноса спина в наноструктурах без приложения внешнего магнитного поля, последний аспект привлекателен с точки зрения полупроводниковой спинтроники. В этой области современных исследований физики полупроводников спин-орбитальное взаимодействие является ключевым физическим эффектом [80, 13], поскольку оно связывает магнитный момент электрона не с магнитным полем, а с электрическим, это создает принципиальную возможность управления спиновой степенью свободы в электронных приборах [80].

2.2 Теория

Рассмотрим туннелирование между двумя квантовыми ямами, разделенными потенциальным барьером. Имея в виду эксперименты по резонансному туннелированию [61, 77], рассмотрим гетероструктуру с квантовыми ямами GaAs, выращенными в направлении [001], обозначим его за ось z , соответствующие оси в плоскости ямы выберем $x \parallel [100]$, $y \parallel [010]$, широкозонные барьеры представляют собой твердый раствор $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ ($x \approx 0.3$). Потенциальный барьер между ямами допускает слабое туннелирование носителей. В зависимости от легирования, квантовые ямы могут быть заполнены либо электронами либо дырками. Первый случай изображен на Рис.2.1а. Здесь квантовые ямы для электронов образованы профилем зоны проводимости. Легирование примесью донорного типа осуществляется двумя примесными слоями, как показано красным кружками. Ионизованные донорные слои имеют положительный электрический заряд, а электрическое поле направлено, как показано на Рис.2.1а. Разность химических потенциалов

электронов создается внешним напряжением смещения U , приложенным непосредственно к квантовым ямам. При этом возможно слабое туннелирование электронов из правой ямы в левую, что соответствует протеканию электрического тока в обратном направлении. В случае туннелирования дырок (р-р туннелирования) ситуация очень похожа, как показано на Рис.2.1,b. На рисунке показан профиль валентной зоны, ионизованные акцепторы образуют два отрицательно заряженных слоя так, что направление электрического поля противоположно п-п случаю, направление туннельного тока совпадает с направлением потока дырок. Полагаем один уровень размерного квантования для электронов для п-п туннелирования и один уровень размерного квантования тяжелых дырок (hh1) в случае р-р туннелирования, предполагается нулевая температура. Задачу о туннелировании электронов и дырок будем рассматривать в рамках метода туннельного гамильтониана Бардина [31, 63]. Гамильтониан системы записывается в виде (см §1.2):

$$H = H_0^L + H_0^R + H_T, \quad (2.1)$$

где H_0^L, H_0^R – "парциальные" гамильтонианы левого и правого слоёв соответственно, а H_T – туннельный член. Задача состоит в вычислении скорости туннельных переходов между слоями и анализе зависимости туннельной проводимости от параметров структуры, в частности от параметров, характеризующих спин-орбитальное взаимодействие. Для определенности будем говорить о туннелировании электронов, излагаемая теория справедлива и для дырок. Важные отличия п-п и р-р случаев возникнут далее при рассмотрении спин-орбитального взаимодействия. Запишем слагаемые (2.1) в представлении вторичного квантования:

$$\begin{aligned} H_0^l &= \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k^l c_{k\sigma}^{l+} c_{k\sigma}^l + \sum_{k,k',\sigma} V_{kk'}^l c_{k\sigma}^{l+} c_{k'\sigma}^l + H_{SO}^l \\ H_T &= \sum_{k,k',\sigma,\sigma'} T_{kk'\sigma\sigma'} c_{k\sigma}^{L+} c_{k'\sigma'}^R + T_{kk'\sigma\sigma'}^* c_{k'\sigma'}^{R+} c_{k\sigma}^L, \end{aligned} \quad (2.2)$$

Здесь индекс l идентифицирует слой, $l = R$ для правого слоя, $l = L$ для левого, k – волновой вектор в плоскости слоев, σ – спиновая переменная, ε_k^l – энергия

электрона в слое l с волновым вектором k , эта энергия равна

$$\varepsilon_k^l = \varepsilon + \varepsilon_0^l + \Delta^l, \quad (2.3)$$

где $\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, m – эффективная масса электрона, ε_0^l – основной энергетический уровень размерного квантования, Δ^l – сдвиг потенциальной энергии при приложении внешнего напряжения к слою l . Второе слагаемое в гамильтониане (2.2) описывает упругое рассеяние на примесях, $V_{kk'}^l$ – матричный элемент оператора рассеивающего потенциала. $T_{kk'\sigma\sigma'}$ – туннельный матричный элемент (туннельный параметр), описанный в §1.2, он имеет смысл туннельного расщепления энергетических уровней из-за перекрытия волновых функций частиц в левого и правого слоя. Прописной буквой t обозначим сам интеграл перекрытия. Мы будем считать, что прикладываемое к системе внешнее напряжение мало по сравнению с энергией Ферми электронов ε_F . Тогда $T \sim t\varepsilon_F$. Слагаемое H_{SO}^l описывает спин-орбитальное взаимодействие. В случае двумерного газа электронов имеются два линейных по волновому вектору k слагаемых [69], отвечающих взаимодействию Рашбы [70, 71] с константой α и взаимодействию Дрессельхауза [72, 73], описываемую константой β :

$$H_{SO} = \alpha (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) + \beta (k_x \sigma_x - k_y \sigma_y) \quad (2.4)$$

Переходя к записи в представлении вторичного квантования получим:

$$\begin{aligned} H_{SO}^l = & \alpha^l \sum_k (k_y - ik_x) c_{k\sigma}^{l+} c_{k\sigma'}^l + (k_y + ik_x) c_{k\sigma'}^{l+} c_{k,\sigma}^l \\ & + \beta^l \sum_k (k_x - ik_y) c_{k\sigma}^{l+} c_{k\sigma'}^l + (k_x + ik_y) c_{k\sigma'}^{l+} c_{k\sigma}^l \end{aligned} \quad (2.5)$$

Для дырок гамильтониан спин-орбитального взаимодействия другой, это важное отличие будет обсуждаться далее. Заметим, что гамильтониан (2.1,2.2) не содержит матричных элементов оператора рассеяния, связывающих разные слои, т.е. величин типа $V_{kk'}^{LR}$, $V_{kk'}^{RL}$. В то же время, в результате вторичного квантования поля примесей вида (короткодействующий потенциал):

$$V(r) = \sum_a V_0 \delta(r - r_a), \quad (2.6)$$

где индекс a означает суммирование по примесям с координатами центров r_a , такие недиагональные по индексам слоев величины, конечно, возникнут наряду с диагональными величинам V^L , V^R . Однако, можно показать, что матричные элементы, содержащие разные индексы слоёв, параметрически малы как по сравнению с внутрислоевыми матричными элементами V^L , V^R , так и с туннельным слагаемым H_T . Действительно введем квадратичные формы матричных элементов оператора рассеяния на примеси:

$$\begin{aligned} A_{kk'}^l &\equiv |V_{k'k}^l|^2 \\ B_{kk'}^{ll'} &\equiv V_{k'k}^l V_{kk'}^{l'} \end{aligned} \quad (2.7)$$

Поскольку, как выяснится в дальнейшем, $A_{kk'}^l$ и $B_{kk'}^{ll'}$ входят линейно в конечное выражение для тока, их можно отдельно усреднить по пространственному распределению примесей. Введем величины $A \equiv \langle A_{kk'}^l \rangle$ и $B \equiv \langle B_{kk'}^{ll'} \rangle$, усредненные по примесям. Здесь мы положили $\langle A^l \rangle = \langle A^{l'} \rangle$ для краткости и опустили индекс l . (Что касается B , то индекс опущен, т.к. $B_{kk'}^{ll'} = B_{kk'}^{l'l}$). A имеет смысл обратного времени рассеяния:

$$\frac{1}{\tau} = \frac{2\pi}{\hbar} \nu \langle |V_{kk'}|^2 \rangle = \frac{2\pi}{\hbar} \nu A, \quad (2.8)$$

где ν – двумерная плотность состояний. Отметим, что усредненные корреляторы A и B имеют разную параметрическую зависимость от туннельной прозрачности t . Действительно, матричные элементы, вычисленные на волновых функциях разных слоёв содержат дополнительную малость, связанную с малостью перекрытия этих волновых функций. Усреднение по положениям примесей обоих корреляторов даёт:

$$\frac{B}{A} \sim t^2 \sim T^2 \quad (2.9)$$

Межслоевые матричные элементы $V^{ll'} \sim \sqrt{B}$, в то время как внутрислоевые матричные элементы $V^l \sim \sqrt{A}$. Учитывая (2.9) имеем:

$$\frac{V^{ll'}}{V^l} \sim t \ll 1$$

Межслоевые матричные элементы $V^{ll'}$ параметрически малы также и по сравнению с туннельным членом в гамильтониане (2.1), поскольку из (2.8),(2.9) следует, что $V^{ll'} \sim t \frac{\hbar}{\tau}$ ($l \neq l'$), в то время как $T \sim t \varepsilon_F$, поэтому:

$$\frac{V^{ll'}}{T} \sim \frac{\hbar}{\varepsilon_F \tau} \ll 1$$

Таким образом, в рамках теории возмущений первого порядка действительно следует учитывать только диагональные по слоям матричные элементы взаимодействия с примесями V^L , V^R . Оператор туннельного тока, как описано в §1.2 имеет следующий вид (1.22):

$$\hat{I} = \frac{ie}{\hbar} \sum_{kk'\sigma\sigma'} [T_{kk'\sigma\sigma'} c_{k'\sigma'}^{R+} c_{k\sigma}^L - T_{kk'\sigma\sigma'}^* c_{k\sigma}^{L+} c_{k'\sigma'}^R],$$

Расчет туннельного тока проведем по теории возмущений, последовательно рассматривая туннелирование и взаимодействие с примесями как два возмущения. Для туннельной проводимости, аналогично случаю обычной проводимости можно получить формулу Кубо, как описано в §1.2. Формула Кубо учитывает взаимодействие в первом порядке, при этом главный порядок в выражения для туннельного тока T^2 . Полагаем, импульс в плоскости и спиновое состояние сохраняются в процессе туннелирования, поэтому имеем следующее выражение для плотности туннельного тока через невозмущенные функции Грина (§1.2):

$$j = \frac{eT^2}{4\pi^3 \hbar^3} \text{Re} \left\{ \text{Tr} \int G^R(p, \varepsilon - eU) G^L(p, \varepsilon) d\mathbf{p} d\varepsilon \right\}, \quad (2.10)$$

где p - импульс электрона в плоскости слоя, G^R, G^L функции Грина для правого и левого слоёв соответственно с учетом рассеяния на примесях. Следующим шагом является выражение функций G^l в терминах невозмущенных функций Грина G_0^l двумерного электронного газа со спин-орбитальным взаимодействием без рассеяния на примесях. Этот расчет сводится к суммированию диаграмм двух типов, представленных на Рис.2.2. Линии соответствуют невозмущенным функциям Грина G_0^l , а кресты соответствуют матричным элементам $V_{kk'}^l$. Лестничные диаграммы типа б. дают вершинные поправки [63, 79]. Однако, лестничные диаграммы

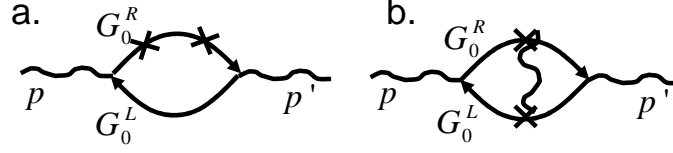


Рис. 2.2: Два типа диаграмм для расчета туннельного тока

не дают существенного вклада в туннельный ток. Можно показать, что для гамильтониана (2.2) верхние ветви диаграмм на Рис.2.2 (соответствующие G_0^R) будут содержать только $V_{kk'}^R$, в то время как нижние – только $V_{kk'}^L$. Поэтому, диаграммы типа а. содержат только квадратичные формы внутрислоевого коррелятора $A_{kk'}$ (2.7), а диаграммы типа б. – только межслоевого коррелятора $B_{kk'}$. Однако, из (2.9) следует, что с учетом усреднения по примесям (при произвольной степени их пространственной корреляции) межслоевой коррелятор имеет более высокий порядок малости по туннельному параметру T и поэтому должен быть опущен при вычислениях в главном порядке. Таким образом, выражение для функции Грина с учетом рассеяния на примесях получается в результате суммирования только диаграмм типа а., поэтому в него входит только время рассеяния на примеси в одном слое и, в отличие от [79], не входит время, отвечающее процессу рассеяния на примесях, расположенных в разных слоях. Таким образом, функции Грина для электронов в слоях должны учитывать процессы рассеяния в слоях, но межслойное рассеяние при расчете тока в ведущем порядке по туннелированию учитывать не следует [A5]. Эти рассуждения применимы и к другим типам рассеяния, так в структурах с высокой подвижностью основным механизмом рассеяния, по видимому, является электрон-электронное рассеяние [63], и в этом случае вклад рассеяния электронов в разных слоях в ведущем порядке также учитывать не следует.

С учетом спина функции Грина G^L, G^R являются матрицами 2×2 . Спинорные базисные состояния характеризуются проекцией углового момента на ось z , стандартный спинорный базис для электронов $(1/2, -1/2)$, для тяжелых дырок спинорный базис $(3/2, -3/2)$. Главное отличие между туннелированием электронов и

туннелированием дырок заключается в различии спин-орбитального взаимодействия. Для двумерных электронов главные оба вклада в спин-орбитальное взаимодействие, слагаемые Рашбы и Дрессельхауза, линейны по волновому вектору в плоскости [81, 69]:

$$H_e^{SO} = \alpha_e (k_y \sigma_x - k_x \sigma_y) + \beta_e (k_x \sigma_x - k_y \sigma_y) \quad (2.11)$$

где k_x, k_y – компоненты волнового вектора в плоскости, σ_x, σ_y – матрицы Паули, ось z перпендикулярно плоскости квантовой ямы, α_e, β_e – константы Рашбы и Дрессельхауза, соответственно. Слагаемое Рашбы предполагается линейным по внешнему электрическому полю $\alpha_e \sim E$. Для исследуемых в экспериментах квантовых ям на основе GaAs р-типа, выращенных в направлении [001], доминирующий вклад Рашбы является кубическим по волновому вектору в плоскости [82, 69], а вклад Дрессельхауза линеен [69]. Полный гамильтониан описывающий спин-орбитальное взаимодействие в валентной зоне для квантовых ям рассмотрим в виде суммы вкладов Рашбы [83] и Дрессельхауза [84] в виде:

$$H_h^{SO} = \alpha_h i (k_-^3 \sigma_+ - k_+^3 \sigma_-) + \beta_h (\sigma_x k_x + \sigma_y k_y), \quad (2.12)$$

где $\sigma_{\pm} = (\sigma_x \pm i\sigma_y)/2$, $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$. Без учета рассеяния в слоях гамильтониан, описывающий движение электрона или дырки в двумерном слое принимает вид:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{d^2}{dx^2} + \frac{d^2}{dy^2} \right) + \hat{H}^{SO}, \quad (2.13)$$

где m – эффективная масса в плоскости слоя. Собственные значения ε этого гамильтониана и собственные векторы ϕ образуют две спин-орбитальных подзоны:

$$\varepsilon_{\mp} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \pm |u|, \quad \phi_{\mp} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \pm 1 \\ \gamma^* \end{pmatrix}, \quad (2.14)$$

где для электронов

$$u = u_e \equiv \alpha_e i k_- + \beta_e k_+,$$

для тяжелых дырок

$$u = u_h \equiv \alpha_h i k_-^3 + \beta_h k_-,$$

для обоих случаев $\gamma = u/|u|$. Будем считать, что рассеяние в слоях не затрагивает спин, поэтому спин-орбитальное взаимодействие (2.11) или (2.12) является единственной спин-зависимой частью в полном гамильтониане. Поэтому, в базисе собственных состояний (ϕ_-, ϕ_+) одночастичная функция Грина имеет вид:

$$G = \begin{bmatrix} G_- & 0 \\ 0 & G_+ \end{bmatrix}, \quad (2.15)$$

где

$$G_{\pm}(k, \varepsilon) = \frac{1}{\varepsilon + \varepsilon_F - \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \pm |u| + i \frac{\hbar}{2\tau} \text{sgn } \varepsilon}, \quad (2.16)$$

ε_F – энергия Ферми в слое в отсутствие приложенного напряжения. Здесь τ – квантовое время рассеяния, учитывающее все процессы внутрислоевого рассеяния, согласно сказанному выше, межслоевое рассеяние не учитывается. При переходе в стандартный спинорный базис матрица функций Грина (2.15) преобразуется к следующему виду:

$$G = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} G_- + G_+ & \gamma(G_- - G_+) \\ \gamma^*(G_- - G_+) & G_- + G_+ \end{bmatrix}. \quad (2.17)$$

Подставляя (2.17) в (2.10) и предполагая спин-орбитальное расщепление малым по сравнению с энергией Ферми получаем следующее конечное выражения для плотности туннельного тока:

$$j = \frac{emT^2}{4\pi^2\hbar^3} \times \int_0^{2\pi} \left[\begin{aligned} & \left(\frac{eU\Gamma}{(eU - \xi_-)^2 + \Gamma^2} + \frac{eU\Gamma}{(eU + \xi_-)^2 + \Gamma^2} \right) (1 + \text{Re}\gamma^L\gamma^{R*}) \\ & + \left(\frac{eU\Gamma}{(eU - \xi_+)^2 + \Gamma^2} + \frac{eU\Gamma}{(eU + \xi_+)^2 + \Gamma^2} \right) (1 - \text{Re}\gamma^L\gamma^{R*}) \end{aligned} \right] d\varphi \quad (2.18)$$

где

$$\begin{aligned} \Gamma &= \frac{\hbar}{\tau} \\ \gamma^{L,R} &= \frac{u^{L,R}}{|u^{L,R}|} \\ \xi_{\pm} &= |u^R(k_F, \varphi)| \pm |u^L(k_F, \varphi)|, \end{aligned} \quad (2.19)$$

индексы L и R обозначают левый и правый слой, φ – полярный угол волнового вектора в плоскости $\mathbf{k} = (k, \varphi)$, $k_F = \sqrt{2m\varepsilon_F}/\hbar$. Полный ток, измеряемый в эксперименте есть $I = j * S$, где S - площадь сечения образца. Выражение (2.18) позволяет вычислить туннельный ток при произвольном соотношении параметров спин-орбитального взаимодействия и является главным аналитическим результатом настоящей главы. Отметим, что кроме изложенного метода расчета [A5] эта формула может быть получена и с помощью уравнений движения для матрицы плотности [A2].

2.3 Результаты расчетов. Частные случаи

Общее выражение (2.18) упрощается в нескольких специальных случаях, при этом зависимость дифференциальной туннельной проводимости $G = dI/dU$ от приложенного напряжения существенно различается в зависимости от соотношения между вкладами Рашбы и Дрессельхауза. Эта зависимость может содержать один или несколько резонансов при напряжениях, соответствующих энергии спин-орбитального взаимодействия. Характерная ширина резонансов Γ и возможность их экспериментального разрешения непосредственно связаны с квантовыми временем рассеяния $\Gamma = \hbar/\tau$.

2.3.1 Одинаковое спин-орбитальное взаимодействие в слоях

В отсутствие спин-орбитального взаимодействия ($\alpha^R = \alpha^L = 0$, $\beta^R = \beta^L = 0$) энергетический спектр для каждого слоя представляет собой параболоид вращения:

$$E^l(k^l) = \varepsilon_0 + \frac{\hbar^2(k^l)^2}{2m} \pm \frac{eU}{2}. \quad (2.20)$$

При туннелировании, в силу сохранения энергии и импульса в плоскости:

$$\begin{aligned} E^R &= E^L \\ k^R &= k^L \end{aligned} \quad (2.21)$$

Оба условия выполняются одновременно только для $U = 0$, так что отличное от нуля напряжение смещения не приводит к туннельному току, несмотря на то, что при одной энергии имеются состояния, занятые электронами в одном слое и пустые состояния в другом. Ограничение, накладываемое сохранением импульса может быть ослаблено, если электрон рассеивается в слое, таким образом туннелирование оказывается возможно при конечных напряжениях вблизи нуля и это приводит к однородному уширению резонансных пиков. В этом случае, а также если спин-орбитальное взаимодействие в точности одинаково в слоях, $u^L = u^R$ общее выражение (2.18) упрощается до известного результата [63]:

$$j = \frac{2emT^2\Gamma}{\pi\hbar^3} \frac{eU}{(eU)^2 + \Gamma^2}. \quad (2.22)$$

Этот случай проиллюстрирован кривой (а) на Рис. 2.3.

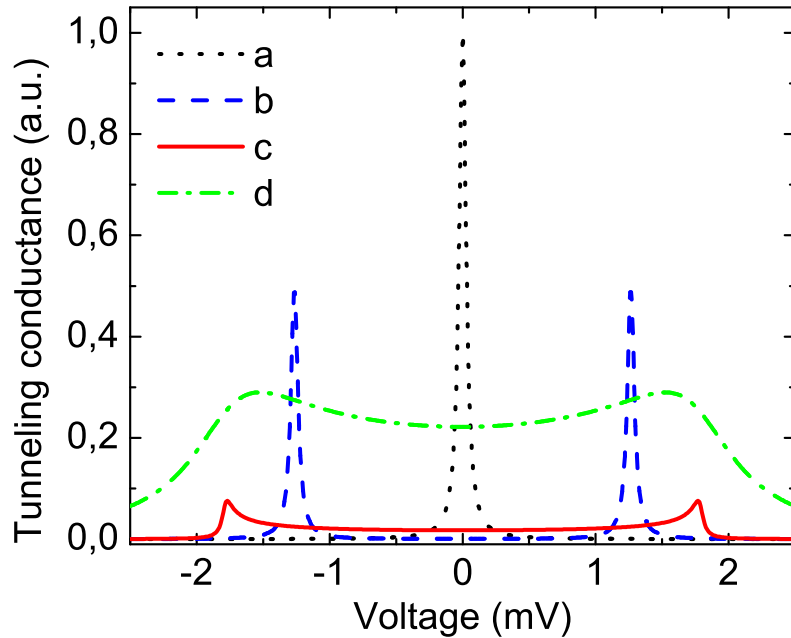


Рис. 2.3: Туннельная проводимость, а: $\varepsilon_F = 10$ мэВ, $\alpha = \beta = 0$, $\tau = 2 * 10^{-11}$ s; b: то же что а, но $\alpha k_F = 0.6$ мэВ; с: то же, что b, но $\beta = \alpha$; d: то же, что с, но $\tau = 2 * 10^{-12}$ s.

2.3.2 Спин-орбитальное взаимодействие Рашбы

Другой предельный случай возникает если в слоях имеется взаимодействие Рашбы одинаковое по величине, но противоположного знака в левом и правом слое. Именно такая ситуация возникает в экспериментах, когда дегирующие слои расположены с двух сторон от системы двумерных слоев и создают электрическое поле противоположного направления в левом и правом слое. При этом будем считать, что вклад Дрессельхауза отсутствует: $|\alpha^R| = |\alpha^L| \equiv \alpha$, $\beta^R = \beta^L \equiv \beta = 0$. Спин-орбитальное взаимодействие приводит к расщеплению спектра на две подзоны. На Рис.2.4 показаны сечения спин-орбитальных подзон изоэнергетиче-

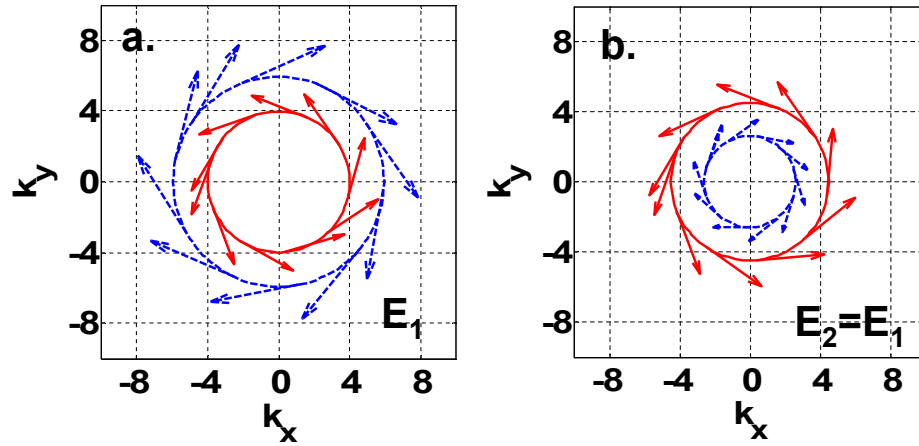


Рис. 2.4: Сечение энергетического спектра электронов в левом (а) и правом (б) слоях для случая $\alpha^L = -\alpha^R$, $\beta^L = \beta^R = 0$.

ской плоскостью для обоих слоев, стрелки показывают среднее значение спина в каждом состоянии с данным вектором k . При приложенном внешнем напряжении $U_0 = 2\alpha k_F/e$ спектры смещаются по шкале энергий таким образом, что сечение “внешней” подзоны в правом слое оказывается равным сечению “внутренней” подзоны в левом слое (см сплошные линии на Рис.2.4). При этом выполняются оба условия (2.21). Однако, туннелирование между слоями может быть по-прежнему запрещено в силу ортогональности спиновых состояний. Если в обоих слоях параметры Рашбы равны $\alpha^R = \alpha^L \equiv \alpha$, то спиновые состояния в этих подзонах

ортогональны и переходы между слоями оказываются запрещены точно так же, как и в случае без спин-орбитального взаимодействия. Однако, если параметры Рашбы противоположны по знаку, т.е. $\alpha^R = -\alpha^L$, $\alpha = |\alpha^R|$, спиновые поляризации в первой подзоне правого слоя и второй подзоне левого слоя одинаковы и туннелирование разрешено именно между этими подзонами, при этом оно запрещено между первыми и между вторыми подзонами в том числе и при нулевом смещении $U = 0$. Эта ситуация, впервые отмеченная в [78, 79], приводит к возникновению пиков дифференциальной проводимости при ненулевом напряжении $U = \pm U_0$, как показано на Рис.2.3,b. В этом случае из общего выражения (2.18) получаем следующий результат для плотности туннельного тока [79], [A2]:

$$j = \frac{emT^2\Gamma}{\pi\hbar^3} \left(\frac{eU}{(eU - 2\delta)^2 + \Gamma^2} + \frac{eU}{(eU + 2\delta)^2 + \Gamma^2} \right), \quad (2.23)$$

где

$$\delta = \alpha_e k_F \quad (\text{для электронов}) \quad (2.24)$$

$$\delta = \alpha_h k_F^3 \quad (\text{для дырок}). \quad (2.25)$$

Вместо одного резонанса при нулевом напряжении в отсутствие спин-орбитального взаимодействия (2.22), теперь имеются два резонанса при напряжении $U = 2\delta/e$. Случай, когда в системе имеется только взаимодействие Дрессельхауза приводит к точно такому же результату. Однако, разные по знаку параметры взаимодействия Дрессельхауза, по-видимому, сложно реализовать практически, т.к. это потребует изготовления слоёв из различных материалов.

2.3.3 Случай “spin helix”

Наличие слагаемого Дрессельхауза (одинакового в обоих слоях) в дополнение к слагаемому Рашбы в спин-орбитальной части гамильтониана приводит к нетривиальным изменениям проводимости вследствие интерференции спиновых состояний в левом и правом слоях. Типичные резонансные особенности в туннельной

вольт-амперной характеристике (ВАХ) возникают при напряжениях, соответствующим характеристической энергии Рашбы δ_R (2.24) и характеристической энергии Дреесельхауза, $\delta_D = \beta_{e,h} k_F$. Режим спиновой спиральности, т.н. “spin helix” [74] соответствует одинаковым по величине вкладам Рашбы и Дреесельхауза, т.е.

$$\beta_e = |\alpha_e| \quad (\text{для электронов})$$

$$\beta_h = |\alpha_h| k_F^2 \quad (\text{для дырок})$$

Соответствующие энергетические спектры и ориентации среднего спина приведены на Рис.2.5. Энергетические спектры и ориентации спина во всех подзонах различны, спинорные состояния подзон левого и правого слоёв не ортогональны, поэтому переходы всегда разрешены, при условии выполнения (2.21). Из Рис.2.5 также видно, что условие (2.21), означающее перекрытие изоэнергетических сечений спектров а. и б. выполняется только в нескольких точках. В ранее рассмотренных случаях перекрытие имело место по всей окружности, Рис.2.4. Поэтому, естественно ожидать, что в рассматриваемом случае туннельная проводимость окажется ниже. Общее выражение (2.18) в рассматриваемом случае также мож-

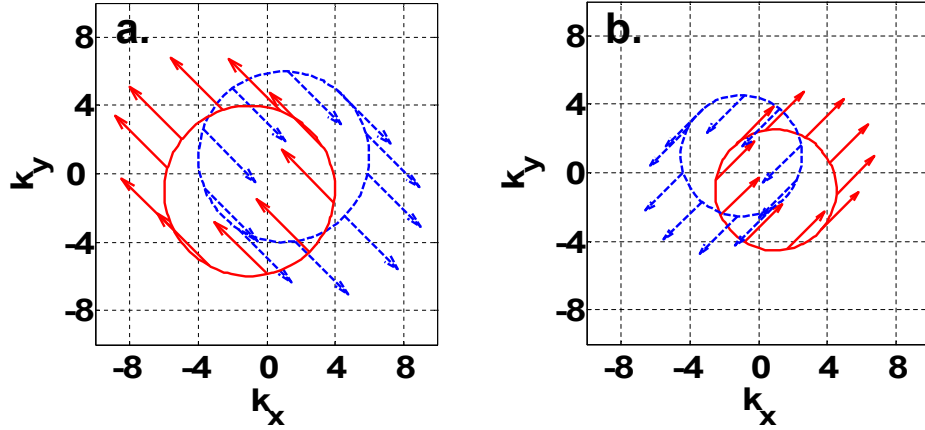


Рис. 2.5: Сечение энергетических спектров в левом (а) и правом (б) слое для случая $\alpha^R = -\alpha^L = \beta$.

но упростить аналитически:

$$\begin{aligned}
j &= \frac{emT^2eU}{\pi\hbar^3} \left(\frac{|\operatorname{Im}\sqrt{g_-}|}{|g_-|} + \frac{|\operatorname{Im}\sqrt{g_+}|}{|g_+|} \right) \\
g_{\pm} &= (eU - i\Gamma)^2 \pm 8\delta^2 \\
\delta &= 2\beta_{e,h}k_F.
\end{aligned} \tag{2.26}$$

Резонансные особенности в этом случае возникают при $eU = \pm 2\sqrt{2}\delta$. Для случая $\Gamma = 0$ точную формулу для скорости туннелирования между слоями можно получить и с помощью золотого правила Ферми. Для этого следует вычислить туннельный матричный элемент $T_{kk'\sigma\sigma'}$ с учетом известных собственных состояний в слоях и проинтегрировать частоту переходов, определяемую согласно золотому правилу как:

$$dw = \frac{2\pi}{\hbar} |T_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma\sigma'}|^2 \delta(E - E') S^2 \frac{d\mathbf{k}d\mathbf{k}'}{(2\pi)^4}.$$

Интегрирование следует проводить в диапазоне $E, E' \in (E_F - eU/2, E_F + eU/2)$, где E_F - уровень Ферми электронов в отсутствие приложенного напряжения, при этом основная трудность состоит в сложной угловой зависимости матричного элемента. В результате получим следующее выражение для плотности туннельного тока:

$$j = \frac{2\pi eT^2}{\hbar\alpha^2} \left(\sqrt{K + \frac{8m\alpha^2eU}{\hbar^2}} - \sqrt{K - \frac{8m\alpha^2eU}{\hbar^2}} \right), \tag{2.27}$$

где

$$K = 2\delta^2 - e^2U^2 + \frac{16m^2\alpha^4}{\hbar^4}$$

Сравнение результатов (2.26) и (2.27) является дополнительной проверкой выражения (2.26). Оба результата приведены на Рис.2.6 и, как, видно, практически совпадают (отличие связано с конечностью τ). Эта же зависимость проводимости от напряжения показана на Рис.2.3,с. Видно, что туннельная проводимость действительно существенно подавляется во всем диапазоне напряжений. Эта ситуация качественно отличается от рассмотренных ранее, в которых рассеяние приводило к уширению резонансных пиков. В данном же случае ослабление ограничений, накладываемых законом сохранения импульса за счет рассеяния увеличи-

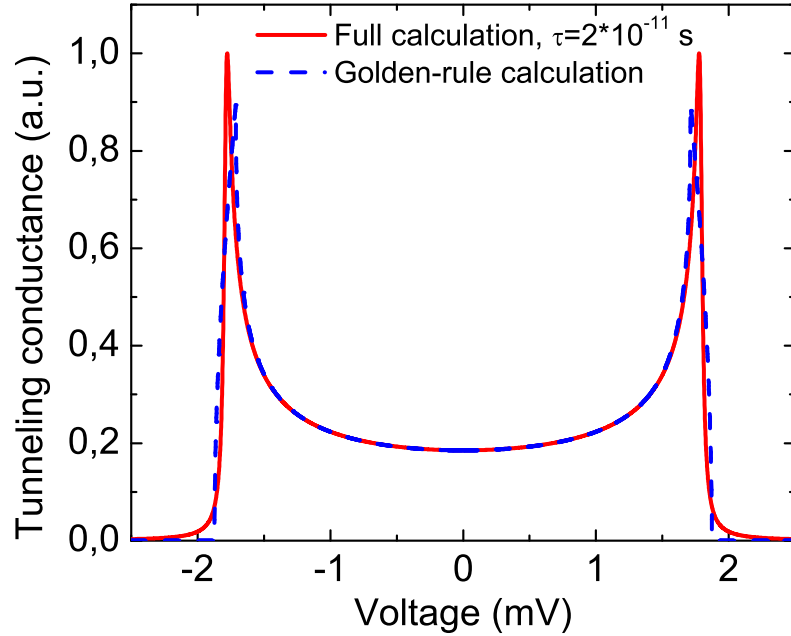


Рис. 2.6: Результаты расчета туннельной проводимости для случая $\alpha^R = -\alpha^L = \beta$ и слабого рассеяния в сравнении с результатом, полученным с помощью золотого правила Ферми в отсутствие рассеяния.

вает скорость туннелирования и проводимость возрастает, т.е. особенности спин-орбитального взаимодействия становятся более выраженными. Такая необычная роль рассеяния понятна из Рис.2.5,a,b. Рассеяние ослабляет ограничения по импульсу, это эквивалентно появлению конечной толщины у линии окружности, пропорциональной τ^{-1} . Соответственно, перекрытие сечений, имеющих теперь “толстые” линии увеличивается, что и приводит к увеличению тока. На Рис.2.3,d приведена проводимость для реалистичного значения времени рассеяния $\tau = 2 * 10^{-12}$ с.

2.3.4 Взаимодействия Рашбы и Дрессехауза в произвольном соотношении

В целом, для произвольных параметров α и β конкретная форма зависимости туннельной проводимости от напряжения очень чувствительна к их значениям. Причиной такой чувствительности, по сути, является “интерференция” угловых

зависимостей собственных спинорных состояний в слоях. Некоторые примеры такой интерференции показаны на Рис.2.7. В расчетах полагалось $\tau = 2 * 10^{-12}$ с. На Рис.2.7,a показаны все ранее рассмотренные случаи: отсутствие спин-орбитального взаимодействия (кривая 1), случай $\alpha_R = -\alpha_L, \beta = 0$ (кривая 2) и $\alpha_R = -\alpha_L = \beta$ (кривая 3). Резонансы уширены в меру величины $\Gamma = \hbar/\tau$ по сравнению с изображенными на Рис.2.3. На рис.2.7,b (кривая 2) приведен расчет проводимости для $\alpha_L = -\frac{1}{2}\alpha_R = \beta$, на Рис.2.7,c (кривая 2) – для случая $\alpha_L = \frac{1}{2}\alpha_R = \beta$. Кривая 1, соответствующая отсутствию спин-орбитального взаимодействия также приведена на всех графиках для сравнения. Несмотря на уширение, интерфе-

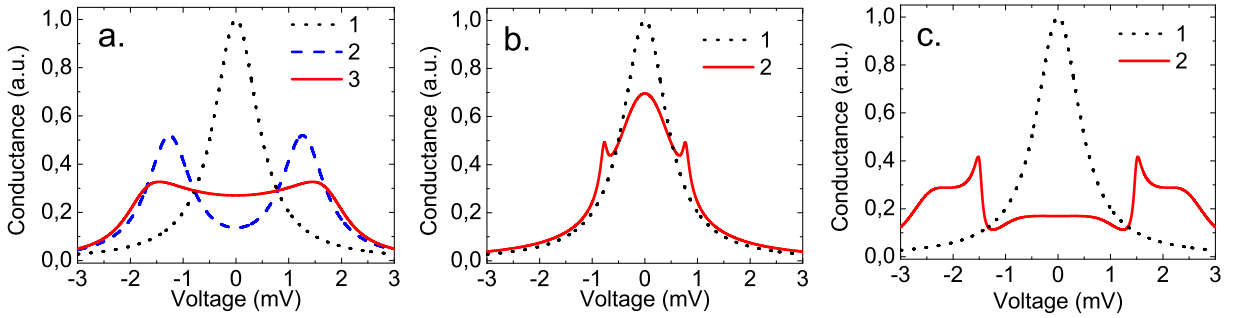


Рис. 2.7: Туннельная проводимость, рассчитанная для различных параметров спин-орбитального взаимодействия

ренционная структура графиков на Рис.2.7 остается чрезвычайно чувствительной к спин-орбитальным параметрам, поэтому поэтому, в принципе, отношение параметров Рашбы и Дрессельхауза может быть определено непосредственно из вида туннельной вольт-амперной характеристики. Конкретный пример, иллюстрирующий высокую чувствительность для набора параметров, соответствующих экспериментальной ситуации будет приведен ниже.

2.4 Оценки и анализ существующих экспериментальных данных

2.4.1 Гетероструктуры AlGaAs/GaAs n-типа

Проанализируем параметры, определяющие положение и ширину спин-орбитальных резонансов туннельной вольт-амперной характеристики в реальной экспериментальной ситуации. Всюду ниже мы будем предполагать, что параметры Рашбы имеют противоположный знак в двух слоях из-за противоположного направления электрического поля, как показано на Рис. 2.1, т.е. $\alpha_{e,h}^L = -\alpha_{e,h}^R$. Параметры Дрессельхауза предполагаются одинаковыми в обоих слоях $\beta_{e,h}^L = \beta_{e,h}^R$. При рассмотрении n-p туннелирования воспользуемся экспериментальными данными, для параметров спин-орбитального взаимодействия, полученными в работе [74] для гетероструктур AlGaAs/GaAs с квантовыми ямами толщиной 12 нм, легированных слоями Si (n-легирование) в барьерах, эти структуры практически аналогичны изучавшемуся в экспериментах по n-p туннелированию [61]. Параметры Рашбы и двумерная концентрация электронов в этих образцах составляли:

$$\begin{aligned}\alpha_e &\approx 2 \cdot 10^{-11} \text{ эВ} \cdot \text{см} \\ n &\approx 5 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}\end{aligned}\tag{2.28}$$

Электрическое поле, создаваемое электрически заряженной плоскостью ионизованных доноров (Fig. 2.1(a)) можно оценить как (единицы СИ):

$$E = \frac{en}{2\varepsilon\varepsilon_0},\tag{2.29}$$

где ε – диэлектрическая проницаемость материала квантовой ямы, e – элементарный заряд, ε_0 – диэлектрическая проницаемость вакуума. При $\varepsilon = 12$ для GaAs и низких температур из (2.28) и (2.29) получаем $E \approx 4 \cdot 10^4$ В/см. Параметр Рашбы α_e пропорционален электрическому полю $\alpha_e = r_e E$, получаем для коэффициента пропорциональности:

$$r_e \approx 5 \cdot 10^{-16} e \cdot \text{см}^2.\tag{2.30}$$

Параметр	Электроны (n-n)	Дырки (h-h)
Двумерная концентрация	$1.6 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$	$7.2 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$
Параметр Рашбы $\alpha_{e,h}$	$6 \cdot 10^{-12} \text{ эВ} \cdot \text{см}$	$1.3 \cdot 10^{-22} \text{ эВ} \cdot \text{см}^3$
Параметр Дрессельхауза $\beta_{e,h}$	$3 \cdot 10^{-11} \text{ эВ} \cdot \text{см}$	$3.6 \cdot 10^{-10} \text{ эВ} \cdot \text{см}$
Энергия Рашбы δ_R	0.005 мэВ	0.05 мэВ
Энергия Дрессельхауза δ_D	0.03 мэВ	0.25 мэВ
Уширение $\Gamma = \hbar/\tau$	0.17 мэВ	0.17 мэВ

Таблица 2.1: Параметры экспериментов по n-n туннелированию [61] и h-h туннелированию [77] между двумя квантовыми ямами в гетероструктурах на основе AlGaAs/GaAs.

Используем полученные значения для анализа экспериментальных данных по n-n туннелированию [61]. Зная двумерную концентрацию электронов, получим параметры Рашбы и соответствующую энергию спин-орбитального взаимодействия $\delta_R = \alpha_e k_F$. Для оценки параметра Дрессельхауза β_e используем непосредственно значения, полученные в экспериментах [74] без какой-либо модификации. В квантовых ямах на основе GaAs/AlGaAs параметр Дрессельхауза содержит вклад, связанный с гетероинтерфейсами [81, 85, 86, 84], при этом параметр Дрессельхауза зависит от толщины квантовой ямы. Однако, в рассматриваемом ниже диапазоне толщин квантовых ям 15-20 нм эта зависимость значительно слабее, чем для параметра Рашбы и в приводимых оценках ее можно не учитывать. Характеристическая энергия Дрессельхауза, определяющая расщепление, равна $\delta_D = \beta_e k_F$. Значения, использованные для анализа эксперимента по n-n туннелированию, приведены в Таблице 2.1 вместе с величиной квантового времени рассеяния, измеренного как уширение резонанса $\Gamma = \hbar/\tau$ в работе [61]. Как видно из Таблицы 2.1, для эксперимента по n-n туннелированию [61] однородное уширение Γ значительно превосходит энергии спин-орбитальных вкладов δ_R, δ_D , так что соответствующие особенности на вольт-амперной характеристике наблюдаются не могут. На Рис. 2.8 изображена нормированная дифференциальная проводимость, рассчитанная по формуле (2.18) для n-n туннелирования с набором параметров, указанных в Таблице 2.1, справа на Рис. 2.8 приведена экспериментальная зависимость дифференциальной туннельной проводимости от напряжения, график из статьи [61].

Расчет воспроизводит экспериментальную зависимость, при этом практически нет

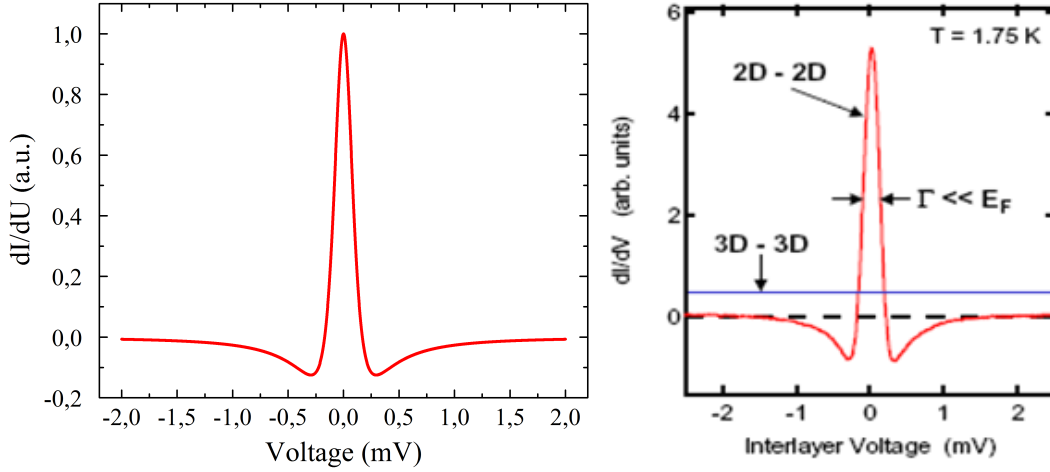


Рис. 2.8: Слева - рассчитанная туннельная дифференциальная проводимость для п-п тунnelирования с набором параметров, соответствующих эксперименту [61] из Таблицы 2.1 Справа - экспериментальная зависимость туннельной проводимости от напряжения между двумерными слоями, график из статьи [61].

видимых отличий от случая без спин-орбитального взаимодействия. Выясним, как должны быть изменены параметры исследуемых структур, для того чтобы спин-орбитальный вклад стал наблюдаем. Заметим, что энергия Рашбы δ_R пропорциональна электрическому полю и фермиевскому волновому вектору k_F , поэтому её параметрическая зависимость от двумерной концентрации носителей $\delta_R \sim n^{3/2}$, аналогичный скейлинг для вклада Дрессельхауза $\delta_D \sim n^{1/2}$. Будем полагать, что Γ не зависит от n . Если бы мы рассматривали электрон-электронное рассеяние как доминирующий механизм в экспериментах [61], скейлинг был бы [87] $\Gamma \sim 1/n$, однако при изменении концентрации легирующей примеси и двумерных электронов другие процессы рассеяния могут играть определяющими роль. Таким образом, для того чтобы энергия спин-орбитального взаимодействия оказалась больше чем Γ , концентрации электронов должна быть повышена по крайней мере на порядок с $n \sim 10^{11} \text{ см}^{-2}$ до $n \sim 10^{12} \text{ см}^{-2}$. Расчет для этого значения представлен кривой 2 на Рис. 2.9. Видно, что резонансная спин-орбитальная структура в этом случае достаточно хорошо разрешена. Насколько такое увеличение уровня легирования без

существенного ухудшения свойств квантовых ям возможно с технологической точки зрения, не вполне ясно, возможно это вполне реализуемо. Как будет показано ниже, ситуация для туннелирования дырок оказывается гораздо более благоприятной с экспериментальной точки зрения.

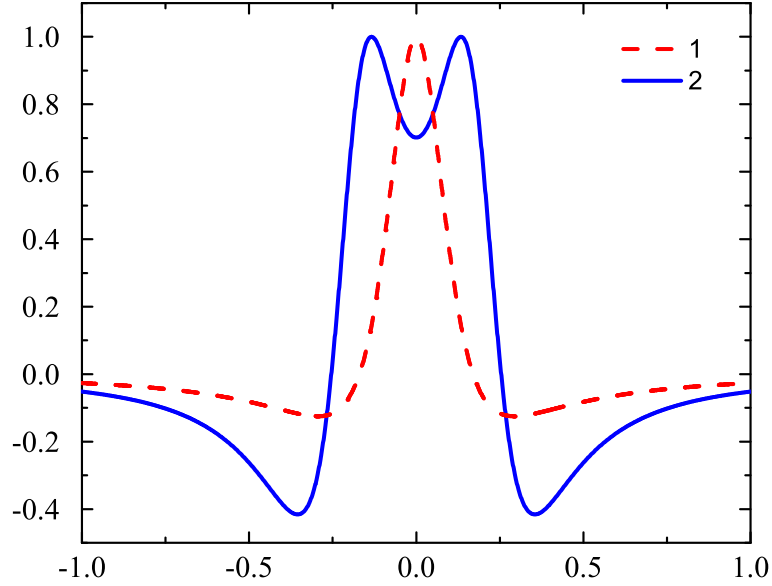


Рис. 2.9: Рассчитанная туннельная дифференциальная проводимость для p-n туннелирования. Кривая 1 представляет расчет с набором параметров, соответствующих эксперименту [61] из Таблицы 2.1, кривая 2 соответствует увеличению двумерной концентрации свободных электронов до $n \sim 10^{12} \text{ см}^{-2}$.

2.4.2 Гетероструктуры AlGaAs/GaAs p-типа

Для случая h-h туннелирования оценку для $r_h = \alpha_h/E$ положим согласно [88] для квантовой ямы толщиной 20 нм:

$$r_h(20 \text{ нм}) \approx 7.5 \cdot 10^{-26} e \cdot \text{см}^4 \quad (2.31)$$

В отличие от электронов, спин-орбитальное взаимодействие Рашбы для тяжелых дырок зависит от расстояния между подзонами легких и тяжелых дырок lh, hh, поэтому оно имеет сильную зависимость от толщины квантовой ямы a [89]. Для глубокой квантовой ямы эта зависимость оказывается $r_h \sim 1/a^4$ (справедливо в

пределах применимости теории возмущений, т.е. для спин-орбитального расщепления малого по сравнению с расстоянием между уровнями размерного квантования (h,hh) [88, 69]. Таким образом, для более узких квантовых ям ширины 15 нм, изучавшихся в экспериментах по h-h туннелированию получим:

$$r_h(15 \text{ нм}) = r_h(20 \text{ нм}) \left(\frac{15}{20}\right)^4 \approx 2.4 \cdot 10^{-26} e \cdot \text{см}^4 \quad (2.32)$$

Оценка для вклада Дрессельхауза для hh1 подзоны в квантовой яме на основе GaAs, выращенной в направлении [001] менее надежна, т.к. в настоящий момент ясных экспериментальных данных на этот счет нет. Из теоретических расчетов с учетом интерфейсного вклада от границ квантовых ям оценка вклада Дрессельхауза для уровня hh1 в квантовой яме GaAs, выращенной в направлении [001] толщиной 10 нм составляет [84] $\beta_h \approx 3.6 \cdot 10^{-10} \text{ эВ} \cdot \text{см}$. Двумерная концентрация дырок в эксперименте по h-h туннелированию [77] $p = 7.2 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$, а фермиевский волновой вектор $k_F \approx 7.4 \cdot 10^5 \text{ см}^{-1}$. С учетом этих значений получаем набор параметров для h-h туннелирования, соответствующих эксперименту [77], представленный в Таблице 2.1. Заметим, что спин-орбитальные энергии δ_R, δ_D на порядок выше, чем в случае p-p туннелирования, и их величина одного порядка с Γ . На Рис. 2.10 приведен результат расчета дифференциальной проводимости для h-h туннелирования с набором параметров, представленных в Таблице 2.1 (сплошная кривая). Пунктирная кривая на Рис.2.10, 2.11 соответствует случаю без спин-орбитального взаимодействия. Таким образом, зависимость, приведённая на Рис. 2.10 с точки зрения параметров расчета соответствует эксперименту [77]. Справа на Рис.2.10 приведена экспериментальная зависимость дифференциальной туннельной проводимости от напряжения, график из статьи [77]. Видно, что спин-орбитальные особенности практически не разрешены, однако небольшая осцилляционная особенность при $U \approx \pm 0.3 \text{ мВ}$ отлично согласуется с особенностью на экспериментальной кривой при напряжении -0.3 мВ . В отличие от случая электронов, значения параметров очень близки к требуемым для экспериментального наблюдения спин-орбитальных особенностей в h-h туннелировании. Кроме того,

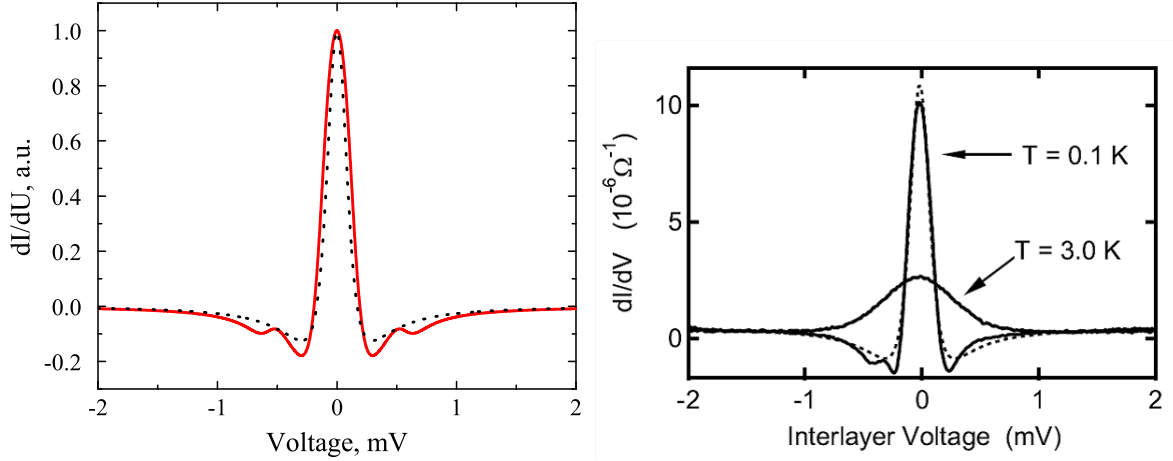


Рис. 2.10: Слева - рассчитанная дифференциальная туннельная проводимость для случая h-h туннелирования. Сплошная кривая представляет расчет с набором параметров, соответствующих эксперименту [77] из Таблицы 2.1, пунктирная кривая соответствует случаю без спин-орбитального взаимодействия. Справа - экспериментальная зависимость туннельной проводимости от напряжения между слоями, график из статьи [77]

поскольку основной вклад в спин-орбитальное взаимодействие Рашбы для тяжелых дырок кубичен по волновому вектору, зависимость от концентрации дырок p является более сильной, чем в случае с электронами, $\delta_R \sim p^{5/2}$. При увеличении p в два раза параметры δ_R, δ_D оказываются значительно больше Γ (соответствующие параметры приведены в Таблице 2.2, поэтому все детали интерференции спин-орбитальных вкладов Рашбы и Дрессельхауза оказываются четко разрешенными, это иллюстрируют результаты расчета, приведенные на Рис. 2.11. Кроме того, в силу резкой зависимости α_h от толщины квантовой ямы, аналогичное увеличение параметра δ_R достигается небольшим увеличением толщины квантовой ямы от 15 нм до 20 нм. Параметр Дрессельхауза β_h , вообще говоря, тоже зависит от толщины квантовой ямы [81, 84], однако далеко не так сильно, как параметр Рашбы, поэтому эта зависимость не учитывается в расчете для квантовой ямы толщиной 20 нм, представленном на Рис. 2.11. Можно заметить, что интерференционные структуры на Рис. 2.11 различаются. Причина этого различия заключается в том, что изменение толщины квантовой ямы не влияет на энергию Дрессельхауза δ_D , в то время как изменение концентрации затрагивает δ_D посредством k_F .

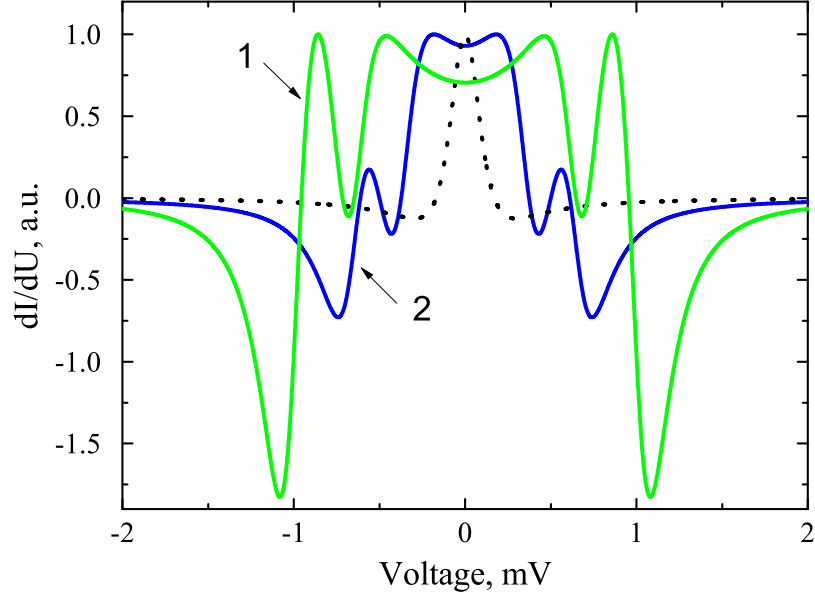


Рис. 2.11: Рассчитанная туннельная дифференциальная проводимость для случая h - h тунnelирования при концентрации дырок увеличенной в 2 раза (кривая 1) до $p = 1.4 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ и при толщине квантовой ямы увеличенной до $a = 20 \text{ нм}$ (кривая 2), пунктирная кривая соответствует случаю без спин-орбитального взаимодействия.

2.4.3 Экспериментальное определение параметров спин-орбитального взаимодействия

Резонансные особенности, возникающие на туннельной вольт-амперной характеристике дают возможность экспериментального определения параметров спин-орбитального взаимодействия. Это особенно актуально для h - h тунnelирования, поскольку в настоящее время имеется весьма ограниченное число методик определения констант спин-орбитального взаимодействия дырок с помощью транспортных из-

Измененный параметр	Двумерная концентрация	Толщина квантовой ямы
Двумерная концентрация	$1.4 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$	$7.2 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$
Толщина ямы	15 нм	20 нм
Энергия Рашбы δ_R	0.32 мэВ	0.18 мэВ
Энергия Дрессельхауза δ_D	0.38 мэВ	0.27 мэВ
δ_R/δ_D	0.83	0.67

Таблица 2.2: Параметры предлагаемого эксперимента по h - h тунnelированию с увеличенной концентрацией дырок (первый столбец) и увеличенной толщиной квантовой ямы (второй столбец).

мерений [82, 90]. Полагая $\alpha_h^R = -\alpha_h^L$, $\beta_h^R = \beta_h^L$, из анализа общего выражения (2.18) заключаем, что возможны три качественно различных ситуации: (i) взаимодействие Рашбы является основным ($\delta_R \gg \delta_D$). В этом случае на туннельной вольт-амперной характеристике возникают два резонанса при $eU \approx \pm 2\delta_R$ в соответствии с (2.23), при нулевом напряжении туннелирование подавлено; (ii) доминирует взаимодействие Дрессельхауза ($\delta_R \ll \delta_D$). Этот случай сводится к одинаковому взаимодействию в слоях. Хотя резонансные знаменатели в подынтегральном выражении (2.18) обращаются в ноль при $e|U| = \xi_+$, соответствующие вклад подавляется ввиду $\gamma^L \gamma^R \approx 1$; (iii) Вклады Рашбы и Дрессельхауза одного порядка $\delta_R/\delta_D \sim 1$. Подынтегральное выражение (2.18) содержит четыре “сингулярности” при $eU = \pm \xi_{\pm}$, поэтому возможно до четырех резонансных пиков на зависимости $dI/dU(U)$, при этом туннелирование при нулевом напряжении не подавлено. Резонансные особенности оказываются очень чувствительными к отношению энергий Рашбы и Дрессельхауза δ_R/δ_D . Для параметров возможного эксперимента по h-h туннелированию, приведенных в Таблице 2.2, реализуется случай (iii). Это создает возможность для определения значений параметров Рашбы и Дрессельхауза с высокой точностью. На Рис. 2.12 показана эволюция туннельной характеристики для случая увеличенной концентрации дырок (первый столбец в Таблице 2.2) при малом изменении отношения δ_R/δ_D . Как видно из Рис. 2.12 изменение этого отношения на 20% (путем изменения параметра Дрессельхауза) заметно меняет интерференционную картину. Точность определения энергии Рашбы подобным способом через положение резонанса можно оценить как $\Gamma/(2\delta_R) \approx 0.2 - 0.5$. Таким образом, рассмотренные спин-орбитальные особенности туннельного транспорта позволяют создать новый метод определения параметров Рашбы и Дрессельхауза с точностью, превосходящей точность других экспериментальных методик, используемых для этой цели [91]. В частности, такой метод позволит экспериментально определить параметр Дрессельхауза для двумерных дырок, величина которого до настоящего времени надежно не установлена.

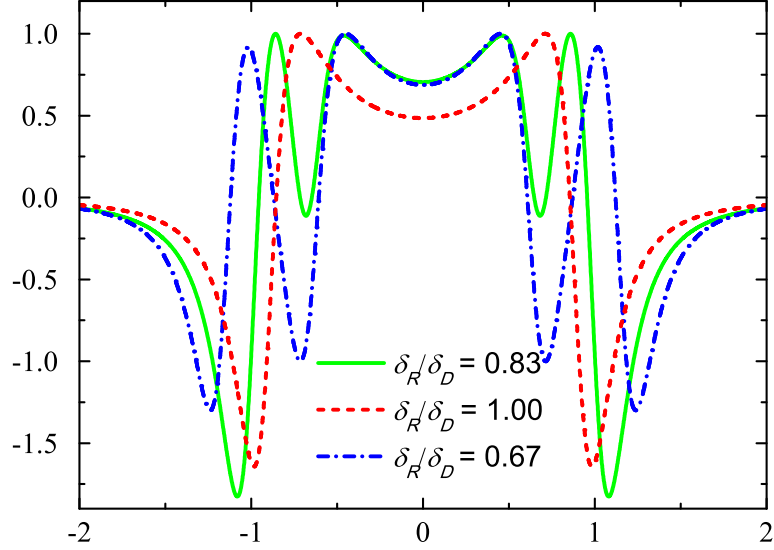


Рис. 2.12: Рассчитанная форма туннельной характеристики для h-h туннелирования при различном отношении вкладов Рашбы и Дрессельхауза. Сплошная кривая ($\delta_R/\delta_D = 0.83$) соответствует параметрам, приведенным в первом столбце Таблицы 2.2. Другие кривые получены варьированием параметра Дрессельхауза.

2.4.4 Гетероструктуры Ge/SiGe

Другим перспективным материалом для наблюдения спин-орбитальных особенностей 2D-2D туннелирования являются гетероструктуры на основе SiGe. Точечная группа симметрии кристаллической решетки Ge имеет центра инверсии, поэтому спин-орбитальное взаимодействие Дрессельхауза в Ge и Si отсутствует и имеется только вклад Рашбы. Как и для гетероструктур AlGaAs/GaAs, рассмотренных выше, спин-орбитальное взаимодействие для тяжелых дырок в квантовой яме больше, чем для электронов, что делает эксперимент по h-h туннелированию более привлекательным. В работах [83, 92] экспериментально исследовались квантовые ямы p-типа на основе напряженных слоев Ge со сравнительно большим расстоянием между уровнями размерного квантования легких (lh) и тяжелых (hh) дырок, и, таким образом, доминирующим кубическим по волновому вектору в плоскости вкладом Рашбы. В экспериментах [83] продемонстрировано спин-орбитальное расщепление $\delta_h = \alpha_h k_F^3$ около 0.3 – 0.4 мэВ. Соответствующее

Параметр	Эксперимент 1	Эксперимент 2
Параметр Рашбы α_h	$1.6 \cdot 10^{-23}$ эВ \cdot см	$5 \cdot 10^{-23}$ эВ \cdot см ³
Энергия Рашбы δ_R	0.35 мэВ	1.6 мэВ
Уширение $\Gamma = \hbar/\tau$	> 3.7 мэВ	1.3 мэВ

Таблица 2.3: Параметры Рашбы и величина однородного уширения резонансов для квантовых ям на основе Ge для структур, исследованных в работе [83] (Эксперимент 1) и в работе [92] (Эксперимент 2). Толщина квантовой ямы $a \approx 11$ нм в обоих случаях.

значение $r_h = 2.3 \cdot 10^{-27} e \cdot \text{см}^4$ на порядок меньше, чем для квантовых ям на основе GaAs (2.32), что является прямым следствием большего расстояния lh-hh, чем в ямах GaAs. Однако, из-за более высокой концентрации дырок в квантовых ямах и наличия дополнительного внешнего электрического поля, энергия Рашбы в этих структурах почти на порядок больше значений, указанных в Таблице 2.1 для h-h туннелирования в GaAs квантовых ямах. В то же время, выигрыш в δ_h оказывается меньше, чем проигрыш в Γ . Транспортное время в квантовых ямах в работе [83] составляло $\tau_{tr} \sim 0.2$ пс, что дает оценку снизу на $\Gamma > \hbar/\tau_{tr} \sim 3$ мэВ. При этом δ_h/Γ значительно меньше 1, так что спин-орбитальные особенности на туннельной вольт-амперной характеристике не могут быть разрешены. Типичный набор параметров из экспериментальной работы [83] приведен в Таблице 2.3 (Эксперимент 1). С другой стороны, параметры гетероструктур на основе Ge, исследованных в работе [92] удовлетворяют требованиям разрешимости спин-орбитальных особенностей в туннельном эксперименте. Отличие этих структур от исследованных в [83] заключается в меньшем расстоянии между уровнями lh-hh (при одинаковой толщине квантовых ям) вследствие оптимизированного механического упругого напряжения, приводящего к существенному увеличению α_h . На Рис. 2.13 представлены рассчитанные туннельные характеристики для параметров образца 'SiGe1' из работы [92], эти параметры приведены в Таблице 2.3 (Эксперимент 2). В отсутствие слагаемого Дрессельхауза плотность тока определяется по формуле (2.23). Как видно из Рис. 2.13, два резонанса при $\pm 2\delta$ четко разрешаются, поэтому в эксперименте по 2D-2D туннелированию между напряженными квантовыми ямами Ge особенности спин-орбитального взаимодействия определяют вид туннельной

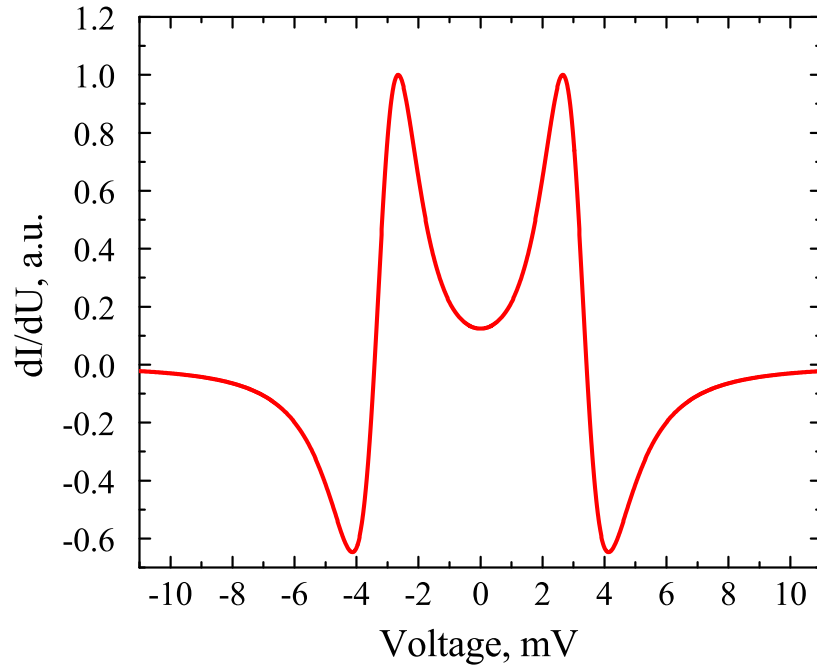


Рис. 2.13: Расчитанная туннельная дифференциальная проводимость для случая h-h тунnelирования между квантовыми ямами на основе Ge, описанными в работе [92], соответствующие параметры приведены в Таблице 2.3 (Эксперимент 2).

характеристики.

2.5 Краткие итоги

В Главе 2 получены следующие основные результаты:

- Построена теория туннелирования между двумерными проводящими слоями со спин-орбитальным взаимодействием.
- Вычислены туннельные вольт-амперные характеристики для туннелирования электронов и туннелирования дырок с учетом спин-орбитального взаимодействия Рашбы и Дрессельхауза.
- Установлены критерии проявления спин-орбитального взаимодействия в резонансном туннелировании между двумерными слоями.

- Предсказано, что эффект будет ярко выражен при туннелировании дырок в гетероструктурах на основе GaAs и SiGe p-типа.
- Показано, что спин-орбитальные особенности туннельного транспорта чрезвычайно чувствительны к величинам параметров Рашбы и Дрессельхауза и их отношению. Это позволяет создать новый метод экспериментального определения параметров СО взаимодействия с высокой точностью.

Глава 3

Резонансно-туннельная гибридизация и оптические свойства гетероструктур с магнитными примесями

3.1 Введение

Гибридизация локализованного квантового состояния с непрерывным спектром делокализованных состояний впервые рассматривалась в работах У. Фано [58] и Ф. Андерсона [59] в контексте атомной спектроскопии. В последнее время эта задача оказывается весьма актуальной и для физики наноструктур [93, 94, 95, 96, 97]. В системах пониженной размерности, квантовых ямах или квантовых проволоках, движение частицы квантовано в одном или двух направлениях, при этом частица движется свободно в других направлениях и может взаимодействовать со связанными состояниями в квантовых точках, дефектах и примесных центрах. Ярким примером такой системы является полупроводниковая гетероструктура, содержащая квантовую яму и ферромагнитный или парамагнитный примесный слой, отделенный от квантовой ямы туннельно-прозрачным потенциальным барьером [98, 99]. Такая структура является примером гибридных систем, сочетающих в себе полупроводниковые и магнитные свойства [100, 101]. Всплеск интереса к подобным системам связан с открытием в конце XX века ферромагнетизма в

разбавленных магнитных полупроводниках (Ga,Mn)As при относительно высокой температуре [102]. Mn в GaAs может формировать акцепторные состояния в конфигурации примеси замещения и донорные состояния в междоузельной конфигурации. Ферромагнитные свойства разбавленных магнитных полупроводников (Ga,Mn)As обусловлены Mn в конфигурации примеси замещения, энергия акцепторного уровня составляет $E_a \approx 110$ мэВ. Микроскопический механизм возникновения ферромагнетизма в таких системах связан с косвенным обменным взаимодействием через свободные или слаболокализованные дырки [103, 104, 105]. Несмотря на большое количество исследований, основные проблемы физики этих систем не решены: детальной теории ферромагнетизма в этих материалах не существует, а температура Кюри не достигает комнатной температуры. Поэтому, в последнее время фокус исследований смещается на системы пониженной размерности. Примерами такой системы являются гетероструктуры, содержащие квантовую яму на основе $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, широкозонные барьеры GaAs и дельта-слой Mn на расстоянии нескольких нанометров от квантовой ямы [99, 106, 107]. Пространственное разделение квантовой ямы и легирующей примеси сохраняет высокую подвижность свободных носителей, но, при этом, влияние примесей на спиновую поляризацию свободных носителей остается значительным [99, 106]. В таких структурах была обнаружена значительная циркулярная поляризация фотолюминесценции из квантовой ямы в магнитном поле, обусловленная слоем Mn, причем на подвижность носителей в плоскости квантовой ямы этот слой примеси влияния не оказывал [108, 109]. Циркулярная поляризация фотолюминесценции из квантовой ямы в магнитном поле свидетельствует о туннельной связи магнитной примеси со свободными носителями в квантовой яме. Энергия акцепторного уровня Mn сопоставима с глубиной квантовой ямы для дырок, поэтому такая туннельная связь является резонансной, связанное состояние дырки на Mn гибридизуется с континуумом двумерных состояний тяжелых дырок в квантовой яме. В результате гибридизации спиновое расщепление локализованных состояний на магнитном

центре во внешнем магнитном поле или эффективном обменном поле затрагивает состояния двумерного континуума и приводит к циркулярной поляризации фотолюминесценции из квантовой ямы. Этот эффект позволяет детектировать магнитное состояние и величину спинового расщепления состояний примесного слоя в полупроводниковой гетероструктуре оптическим способом. Настоящая глава посвящена последовательному теоретическому анализу этой задачи.

3.2 Туннелирование между связанным состоянием и квантовой ямой

Рассмотрим полупроводниковую гетероструктуру, содержащую квантовую яму, в которой имеется один уровень размерного квантования для электронов или дырок и отстоящий от неё на небольшое расстояние (несколько нанометров) дельта-слой легирующей примеси донорного или акцепторного типа, соответственно. Будем рассматривать случай резонансной гибридизации, когда энергетический уровень примесного состояния лежит в энергетическом диапазоне заполненных состояний двумерного континуума первой подзоны размерного квантования в квантовой яме. Потенциальный барьер, разделяющий примесь и квантовую яму допускает слабое туннелирование. Рассмотрим задачу в рамках метода туннельного гамильтониана (§1.2). Полный гамильтониан представим в виде

$$H = H_i + H_{QW} + H_T,$$

где H_i – гамильтониан, собственным состоянием которого является локализованное состояние на примеси, H_{QW} – гамильтониан, описывающий состояния в квантовой яме в отсутствие туннельной гибридизации, эти состояния φ_λ образуют невырожденный континуум и характеризуются квантовыми числами λ . Слагаемое H_T описывает туннелирование. В представлении вторичного квантования (1.41)

$$H = \varepsilon_0 a^+ a + \int \varepsilon_\lambda c_\lambda^+ c_\lambda d\lambda + \int (t_\lambda c_\lambda^+ a + t_\lambda^* a^+ c_\lambda) d\lambda, \quad (3.1)$$

где a^+, a – операторы рождения и уничтожения для связанного состояния, характеризованного энергией ε_0 , c_λ^+, c_λ – операторы рождения и уничтожения для состояний континуума с энергией ε_λ . Здесь и далее энергию будем отсчитывать от основного уровня размерного квантования носителей в квантовой яме, будем рассматривать только одну подзону размерного квантования. Таким образом, ε_λ является кинетической энергией носителя заряда в квантовой яме. Рассмотрим полупроводниковую гетероструктуру на основе соединений $A_{III}B_V$. Вычислим туннельный матричный элемент для случая квантовой ямы n -типа и состояний простой зоны проводимости S -типа, а также для случая квантовой ямы p -типа и сложной валентной зоны в сферическом приближении [A8]. Притягивающий потенциал примеси будем считать сферически симметричным, так что вся система (примесь+квантовая яма) обладает цилиндрической симметрией C_∞ с осью z , направленной перпендикулярно плоскости квантовой ямы и проходящей через центр примеси. Поэтому делокализованные состояния квантовой ямы удобно представить в цилиндрическом базисе. Каждое состояние характеризуется волновым числом k и номером цилиндрической гармоники l :

$$\varphi_{kl} = \eta(z) \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2}} J_l(k\rho) e^{il\theta}, \quad (3.2)$$

где $J_l(k\rho)$ – функция Бесселя порядка l , ρ и θ – полярные координаты в плоскости квантовой ямы, m – эффективная масса в плоскости, $\eta(z)$ – огибающая волновой функции размерно-квантованного состояния в направлении z . Волновая функция (3.2) имеет нормировку:

$$\langle \varphi_{kl} | \varphi_{k'l'} \rangle = \delta(\varepsilon - \varepsilon') \delta_{ll'}, \quad (3.3)$$

где $\varepsilon = \hbar^2 k^2 / 2m$. Потенциальный барьер, разделяющий не слишком мелкий примесный уровень и квантовую яму в первом приближении будем считать прямоугольным. Внутри барьера функция $\eta(z)$ имеет вид (ось z -направлена в сторону примеси, $z = 0$ соответствует границе квантовой ямы):

$$\eta(z) \sim \frac{1}{\sqrt{a}} e^{-qz}, \quad (3.4)$$

где $q = \sqrt{\frac{2mE_0}{\hbar^2}}$, a – ширина квантовой ямы, E_0 – энергия связи локализованного состояния, эта же энергия E_0 определяет высоту потенциального барьера. Рассмотрим сначала случай туннельной гибридизации двумерных электронов с локализованным состоянием донорного типа в полупроводниках типа $A_{III}B_V$. Вычисление туннельного матричного элемента в этом случае наиболее просто. Волновая функция основного состояния электрона в сферически симметричном потенциале примеси донорного типа в этом случае сферически симметрична и не содержит угловой зависимости, поэтому ненулевые интегралы перекрытия возникают только с нулевой цилиндрической гармоникой $\varphi_{k0} \equiv \varphi(\varepsilon)$. Для достаточно глубокого примесного уровня удобно использовать приближение потенциала нулевого радиуса [110] и представить локализованную волновую функцию S -типа в виде:

$$\psi = \sqrt{\frac{q}{2\pi}} \frac{e^{-qr}}{r}. \quad (3.5)$$

При вычислении туннельного матричного элемента (1.19) интегрирование ведется по поверхности, расположенной внутри барьера, наиболее удобно выбрать ее проходящей через центр примеси. Тогда для туннелирования электронов между донорным уровнем и квантовой ямой получаем:

$$t_k^e = \sqrt{\frac{1}{2aq \left(1 + \frac{k^2}{q^2}\right)}} \sqrt{E_0} e^{-qd}. \quad (3.6)$$

Видно, что для рассматриваемого случая $k \ll q$ туннельный параметр слабо зависит от k .

Для того, чтобы применить этот подход к случаю двумерных дырок, взаимодействующих с акцепторным уровнем, необходимо обобщение на случай сложной структуры валентной зоны [A7],[A8]. Рассмотрим квантовую яму на основе $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ и одну подзону размерного квантования тяжелых дырок НН1, подзону легких дырок будем считать отщеплённой вследствие размерного квантования. Базис блоховских амплитуд сформирован состояниями с определенной проекцией полного момента $J = 3/2$ на ось z , перпендикулярную плоскости квантовой

ямы [111]:

$$(e_{3/2}, e_{1/2}, e_{-1/2}, e_{-3/2}). \quad (3.7)$$

Волновые функции $\varphi_{kl,j}$ в этом базисе имеют вид:

$$\varphi_{kl,-\frac{3}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \varphi_{kl}(\rho) \end{pmatrix}, \quad \varphi_{kl,+\frac{3}{2}} = \begin{pmatrix} \varphi_{kl}(\rho) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.8)$$

Кинетическая энергия состояния дырки тяжелой дырки в квантовой яме связана с волновым вектором k

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m'_{hh}}, \quad (3.9)$$

где m'_{hh} масса тяжелой дырки в плоскости квантовой ямы.

Для определения волновой функции ψ дырки, локализованной на акцепторе рассмотрим кинетическую часть, описываемую гамильтонианом Латтинжера и притягивающий потенциал акцептора $U(r)$. Сферически симметричный потенциал сохраняет симметрию Γ_8 , поэтому основное состояние 4-кратно вырождено и может быть классифицировано по проекции углового момента. Собственные функции гамильтониана Латтинжера со сферически симметричным притягивающим потенциалом можно получить в явном виде для модели потенциала нулевого радиуса [112]. В базисе блоховских амплитуд они имеют следующий вид:

$$\begin{aligned} \psi_{+\frac{3}{2}} &= \begin{pmatrix} R_0 Y_{00} + \frac{1}{\sqrt{5}} R_2 Y_{20} \\ -\frac{2}{\sqrt{10}} R_2 Y_{21} \\ \frac{2}{\sqrt{10}} R_2 Y_{22} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \psi_{+\frac{1}{2}} = \begin{pmatrix} \frac{2}{\sqrt{10}} R_2 Y_{2,-1} \\ R_0 Y_{00} - \frac{1}{\sqrt{5}} R_2 Y_{20} \\ 0 \\ \frac{2}{\sqrt{10}} R_2 Y_{22} \end{pmatrix}, \\ \psi_{-\frac{1}{2}} &= \begin{pmatrix} \frac{2}{\sqrt{10}} R_2 Y_{2,-2} \\ 0 \\ R_0 Y_{00} - \frac{1}{\sqrt{5}} R_2 Y_{20} \\ \frac{2}{\sqrt{10}} R_2 Y_{21} \end{pmatrix}, \quad \psi_{-\frac{3}{2}} = \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{\sqrt{5}} R_2 Y_{2,-2} \\ -\frac{2}{\sqrt{10}} R_2 Y_{2,-1} \\ R_0 Y_{00} + \frac{1}{\sqrt{5}} R_2 Y_{20} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Здесь

$$\begin{aligned}
R_0 &= C_0 \left(\frac{\beta}{r} e^{-qr\sqrt{\beta}} + \frac{e^{-qr}}{r} \right), \\
R_2 &= C_0 \left(\frac{\beta}{r} e^{-qr\sqrt{\beta}} \left(1 + \frac{3}{qr\sqrt{\beta}} + \frac{3}{q^2 r^2 \beta} \right) - \frac{e^{-qr}}{r} \left(1 + \frac{3}{qr} + \frac{3}{q^2 r^2} \right) \right), \\
C_0 &= \sqrt{\frac{q}{\beta^{3/2} + 1}}, \\
q &= \sqrt{\frac{2m_{hh}E_0}{\hbar^2}}, \\
\beta &= \frac{m_{lh}}{m_{hh}},
\end{aligned} \tag{3.11}$$

E_0 – энергия связи дырки на акцепторе, Y_{lm} – сферические функции. m_{lh}, m_{hh} – масса легкой и тяжелой дырки в материале барьера, соответственно. Заметим, что радиальная часть волновых функций (3.10) имеет две характеристические длины затухания и наибольшая из них определяется массой легкой дырки, в GaAs $m_{lh} \approx 0.08 m_0$, где (m_0 – масса свободного электрона).

При вычислении туннельного матричного элемента в качестве оператора кинетической энергии в выражении (1.18) подставим кинетическую часть гамильтониана Латтинжера (k_x, k_y, k_z – операторы проекций волнового вектора на соответствующие оси) [5]:

$$K = \begin{pmatrix} F & H & I & 0 \\ H^* & G & 0 & I \\ I^* & 0 & G & -H \\ 0 & I^* & -H^* & F \end{pmatrix}, \tag{3.12}$$

$$\begin{aligned}
F &= -Ak^2 - \frac{B}{2} (k^2 - 3k_z^2), \\
G &= -Ak^2 + \frac{B}{2} (k^2 - 3k_z^2), \\
H &= Dk_z (k_x - ik_y), \\
I &= \frac{\sqrt{3}}{2} B (k_x^2 - k_y^2) - iDk_x k_y,
\end{aligned} \tag{3.13}$$

A, B, D – параметры, описывающие валентную зону, с помощью $\mathbf{k} - \mathbf{p}$ метода они выражаются через матричные элементы оператора импульса [5]. Функции $\psi_\alpha, \varphi_{\lambda\beta}$

в (1.18) теперь являются 4-компонентными, также добавим спиновые индексы α, β . Аналогично случаю простой зоны интегрирование (1.18) по всему пространству сводится к интегрированию по поверхности Ω_S внутри барьера, при этом важна только z -проекция оператора кинетической энергии. Выражение для туннельного параметра упрощается к виду:

$$t_{kl\alpha\beta}^h = (B - A) \int_{\Omega_S} dS \left(\varphi_{kl\beta}^* \frac{d}{dz} \psi_\alpha - \psi_\alpha \frac{d}{dz} \varphi_{kl\beta}^* \right), \quad (3.14)$$

где φ_{kl} дается выражением (3.2).

Это обобщение на случай валентной зоны имеет некоторые нюансы. Наибольшая длина затухания волновой функции ψ_α связанного состояния определяется массой легкой дырки, однако длина затухания состояний в квантовой яме определяется массой тяжелой дырки. Поэтому, результат интегрирования (3.14) существенным образом зависит от положения поверхности интегрирования в барьере. Однако, можно показать, что в случае двух масс экспоненциальная зависимость туннельного параметра от толщины барьера определяется наименьшей массой, но точное значение туннельного параметра в таком подходе определить корректно нельзя. Определим $q = \frac{\sqrt{2m_{hh}E_0}}{\hbar^2}$, $\beta = m_{lh}/m_{hh}$. Явное вычисление интегралов перекрытия с учетом $k \ll q$ показывает, что эффективная туннельная связь возникает только между нулевой цилиндрической гармоникой $\varphi_{k0, -\frac{3}{2}}$ и локализованным состоянием $\psi_{-\frac{3}{2}}$, а также между $\varphi_{k0, +\frac{3}{2}}$ и $\psi_{+\frac{3}{2}}$. В обоих случаях параметр туннельной связи $t_k^h \equiv t_{k0}^h$:

$$t_k^h = \left(\frac{A - B}{\hbar^2/2m_0} \right) \sqrt{4aq} \sqrt{\frac{m_{hh}m'_{hh}}{m_0^2}} \zeta(k/q) \beta \sqrt{E_0} \exp\left(-\chi(k/q) \sqrt{\beta} qd\right), \quad (3.15)$$

где $1 \leq \chi \leq 2$, $\zeta \sim 1$ – безразмерные величины, слабо зависящие от k/q . Туннельный параметр t_k^h экспоненциально зависит от толщины барьера с показателем, определяемом массой легкой дырки. Явный вид χ и ζ зависит от конкретного сечения в барьере, по которому проводится интегрирование при вычислении туннельного матричного элемента.

Как в случае туннелирования электронов, так и для тяжелых дырок можно считать, что туннельные параметры t_k^e, t_k^h не зависят от k , поскольку слабое туннелирование предполагает $k \ll q$. Однако, форма барьера может быть важна, особенно при анализе экспериментальной зависимости наблюдаемых от расстояния d между примесным слоем и квантовой ямой.

3.3 Влияние резонансно-туннельной гибридизации на прямые излучательные переходы

Туннельный гамильтониан (3.1) с известным туннельным параметром t позволяет найти собственные функции Ψ всей системы как разложение по известным волновым функциям связанного состояния ψ и делокализованным состояниям квантовой ямы $\varphi(\varepsilon)$:

$$\Psi(E) = \nu_0(E) \psi + \int_0^\infty \nu(E, \varepsilon) \varphi(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (3.16)$$

E обозначает энергию состояния Ψ . Здесь $\varphi(\varepsilon)$ – волновые функции с нулевой цилиндрической гармоникой, как было показано выше остальные гармоники не участвуют в туннельной гибридизации. Применяя метод Фано-Андерсона, подробно изложенный в §1.2, §1.4 получим для коэффициентов разложения в (3.16):

$$\begin{aligned} \nu_0^2(E) &= \frac{t^2(E)}{\pi^2 t^4(E) + (E - \tilde{\varepsilon}_0)^2}, \\ \nu(E, \varepsilon) &= \nu_0(E) \left(P \frac{t(\varepsilon)}{E - \varepsilon} + Z(E) t(E) \delta(E - \varepsilon) \right), \end{aligned} \quad (3.17)$$

где

$$\begin{aligned} Z(E) &= \frac{E - \varepsilon_0 - F(E)}{t^2(E)}, \\ F(E) &= \int_0^\infty P \frac{t^2(\varepsilon)}{(E - \varepsilon)} d\varepsilon, \end{aligned} \quad (3.18)$$

$$\tilde{\varepsilon}_0(E) = \varepsilon_0 + F(E). \quad (3.19)$$

Поскольку $k \ll q$ можно положить $t = \text{const}$ всюду, кроме (3.18), где убывание t при $E \rightarrow \infty$ необходимо для сходимости интеграла.

Выясним влияние резонансной туннельной гибридизации на спектр фотолюминесценции их квантовой ямы. Для этого необходимо вычислить матричный элемент оператора \hat{M} , описывающий межзонные прямые оптические переходы между гибридизованным состоянием $|\Psi(E)\rangle$ в одной зоне (например, валентной зоне) и состоянием в другой зоне (в зоне проводимости), обозначим его $|\xi_{k'l'}\rangle$, где k' – величина волнового вектора, l' – номер цилиндрической гармоники аналогично (3.2). Будем считать, что (а) отсутствуют прямые оптические переходы между локализованным состоянием $|\psi\rangle$ и состоянием $\xi_{k'l'}$, поэтому матричный элемент переходов из локализованного состояния:

$$\langle \xi_{k'l'} | \hat{M} | \psi \rangle = 0, \quad (3.20)$$

(б) межзонные оптические переходы являются прямыми и происходят с сохранением волнового вектора. В соответствии с (3.2) волновые функции $\varphi(\varepsilon)$ и $\xi(\varepsilon')$, соответствующие нулевой цилиндрической гармонике имеют вид:

$$\begin{aligned} \varphi(\varepsilon) &= \eta(z) \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2}} J_0(k\rho) \\ \xi(\varepsilon') &= \zeta(z) \sqrt{\frac{m'}{2\pi\hbar^2}} J_0(k'\rho), \end{aligned} \quad (3.21)$$

где

$$k = \frac{\sqrt{2m\varepsilon}}{\hbar}, \quad k' = \frac{\sqrt{2m'\varepsilon'}}{\hbar},$$

$\eta(z), \zeta(z)$ – волновые функции размерного квантования в направлении z , m, m' – масса электрона и дырки в плоскости квантовой ямы. Штрих соответствует типу носителей, не испытывающих туннельную гибридизацию. В отсутствие туннельной связи матричный элемент для прямых оптических переходов между состояниями $|\varphi(\varepsilon)\rangle$ и $|\xi(\varepsilon')\rangle$ имеет следующий вид:

$$M_0(\varepsilon', \varepsilon) = \langle \xi(\varepsilon') | \hat{M} | \varphi(\varepsilon) \rangle = \gamma u_k \frac{\sqrt{mm'}}{k\hbar^2} \delta(k - k'), \quad (3.22)$$

где u_k – дипольный матричный элемент оптического перехода для блоховских амплитуд,

$$\gamma = \int \eta(z)\zeta(z)dz.$$

Согласно приведенным выше соображениям только этот матричный элемент модифицируется при туннельной гибридизации, а матричные элементы, соответствующие переходам между ненулевыми цилиндрическими гармониками остаются неизменными. Таким образом, задача состоит в нахождении модифицированного матричного элемента M для оптических переходов между состояниями $\Psi(E)$ и $\xi(\varepsilon')$. Поскольку волновые функции (3.21) не являются локализованными, воспользуемся асимптотикой функции Бесселя:

$$\begin{aligned}\varphi(\varepsilon) &\sim \eta(z) \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2}} \sqrt{\frac{2}{\pi\rho}} \cos(k\rho - \pi/4) \\ \xi(\varepsilon') &= \zeta(z) \sqrt{\frac{m'}{2\pi\hbar^2}} \sqrt{\frac{2}{\pi k'\rho}} \cos(k'\rho - \pi/4)\end{aligned}\quad (3.23)$$

Туннельная гибридизация такой волновой функции с локализованным уровнем приводит к появлению фазы резонансного рассеяния Δ , как это описано в §1.4. Из (1.53) следует, что асимптотически

$$\Psi(E) \approx \eta(z) \sqrt{\frac{m}{2\pi\hbar^2}} \sqrt{\frac{2}{\pi k_E \rho}} \cos(k_E \rho - \pi/4 + \Delta),$$

где, в соответствии с (1.63),

$$\Delta = -\arctan \frac{\pi t^2}{E - \tilde{\varepsilon}_0}.$$

Тогда

$$M(\varepsilon', E) = \langle \xi(\varepsilon') | \hat{M} | \Psi(E) \rangle = \cos \Delta \cdot M_0 - \sin \Delta \cdot M_{\sin}, \quad (3.24)$$

где

$$M_{\sin} \sim \int_0^{\infty} \cos(k'\rho - \pi/4) \sin(k\rho - \pi/4) d\rho$$

Можно видеть, что

$$\frac{M_{\sin}}{M_0} \sim \frac{\int_0^L \cos(k\rho - \pi/4) \sin(k\rho - \pi/4) d\rho}{\int_0^L \cos(k\rho - \pi/4) \cos(k\rho - \pi/4) d\rho} \sim \frac{1}{L}, \quad L \rightarrow \infty,$$

поэтому последнее слагаемое в (3.24) следует опустить и, в конечном итоге, получаем:

$$M = M_0 \cos \Delta.$$

Учитывая (1.54) имеем:

$$M(\varepsilon', E)^2 = M_0(\varepsilon', E)^2 \left[1 - \frac{\pi^2 t^4}{\pi^2 t^4 + (E - \tilde{\varepsilon}_0)^2} \right]. \quad (3.25)$$

Вычислим далее скорость переходов согласно золотому правилу Ферми :

$$W(\hbar\omega) = \frac{2\pi}{\hbar} \int_0^\infty \int_0^\infty |M(\varepsilon', E)|^2 f'(\varepsilon') f^h(E) \delta(E + \varepsilon' + E_g - \hbar\omega) dE d\varepsilon', \quad (3.26)$$

где E_g – ширина запрещенной зоны в квантовой яме, $\hbar\omega$ – энергия излученного фотона, f^h, f' – функции распределения по энергии носителей в гибридизованной и негибридизованной зонах, соответственно. Подставляя (3.22) и (3.25) в (3.26) следует корректно учесть дельта-функцию для волновых чисел нулевой цилиндрической гармоники. Можно показать, что:

$$\delta^2(k - k') = \frac{\sqrt{S}}{\pi^{3/2}} \delta(k - k'),$$

где S – площадь квантовой ямы. В этом случае приходим к выражению:

$$W(\hbar\omega) = \frac{u^2 f(E_\omega)}{\pi^{1/2} \hbar^2} \frac{\sqrt{2\tilde{m}S}}{\sqrt{\hbar\omega - E_g}} \left(1 - \frac{\pi^2 t^4}{\pi^2 t^4 + (E_\omega - \tilde{\varepsilon}_0)^2} \right), \quad (3.27)$$

где

$$f(E_\omega) = f'(\alpha^{-1} E_\omega) f^h(E_\omega),$$

$$E_\omega = \frac{\hbar\omega - E_g}{1 + \alpha^{-1}},$$

$$\tilde{m} = \frac{mm'}{m + m'},$$

$$\alpha = m'/m,$$

(3.28)

Для всех цилиндрических гармоник вместе скорость оптических переходов без гибридизации равна:

$$W_0(\hbar\omega) = \frac{2\pi u^2 f(E_\omega)}{\hbar} \left(\frac{\tilde{m}}{\hbar^2} S \right). \quad (3.29)$$

Результат (3.27), полученный для одиночной примеси можно применить и к ансамблю примесей, если взаимодействие между ними достаточно слабое по сравнению с туннельной связью с квантовой ямой. В этом случае площадь образца следует заменить на n^{-1} , где n – двумерная концентрация примесей в дельта-слое. После нормировки на площадь квантовой ямы из (3.27),(3.29) в конечном итоге получаем спектральную плотность интенсивности фотолюминесценции:

$$I(\hbar\omega, \tilde{\varepsilon}_0) = I_0(\hbar\omega) \left(1 - a(\tilde{\varepsilon}_0) \sqrt{n} \frac{\pi^2 t^4}{\pi^2 t^4 + (E_\omega - \tilde{\varepsilon}_0)^2} \right), \quad (3.30)$$

где

$$a(\tilde{\varepsilon}_0) = \frac{\hbar}{\pi^{3/2} \sqrt{2\tilde{m}\tilde{\varepsilon}_0} (1 + \alpha^{-1})},$$

$$I_0(\hbar\omega) = \frac{2\pi u^2 \tilde{m}}{\hbar^3} f(E_\omega).$$

Оказывается, что, хотя плотность состояний вблизи энергии, соответствующей связанному состоянию имеет пик (1.63), интенсивность фотолюминесценции наоборот, имеет минимум ('провал'). Этот 'провал' является следствием фазовых соотношений гибридизованной волновой функции вблизи резонансной энергии. Этот эффект, по существу, является новой разновидностью резонанса Фано. Отличие от классического резонанса Фано заключается в том, что при расчёте последнего матричный элемент оптических переходов полагается слабо зависящим от разности импульсов начального и конечного состояния (что, например, оправдано для расчета спектра поглощения), в то время как в рассмотренном выше случае прямых оптических переходов, наоборот, эта зависимость предполагается крайне резкой, отражающей требование сохранения импульса в плоскости квантовой ямы. Вместо характерного асимметричного профиля резонанса Фано, в данном случае спектральная зависимость интенсивности излучательной рекомбинации представляет собой практически симметричный 'провал' с минимумом, соответствующим энергии связанного состояния.

3.4 Оптическая поляризация фотолюминесценции при резонансно-туннельной гибридизации

Как следует из выражения (3.30), наличие связанного состояния в диапазоне энергий заполненных состояний континуума приводит к “провалу” в спектре фотолюминесценции из квантовой ямы в области энергии связанного состояния. Если в силу каких-либо причин связанное состояние расщепляется по энергии, спектр фотолюминесценции будет содержать несколько таких провалов, отстоящих друг от друга на энергию расщепления Δ . Например, внешнее магнитное поле, приложенное в направлении z приводит к расщеплению уровня вследствие эффекта Зеемана. Каждый подуровень характеризуется проекцией спина на ось z и взаимодействует только с одной спиновой подзоной в квантовой яме, характеризуемой той же проекцией спина. Заметим, что это утверждение справедливо в отсутствие кулоновских корреляций на примесном центре, настоящее рассмотрение ограничивается именно такой ситуацией. Таким образом, для каждой из циркулярных поляризаций σ^+ , σ^- излучения из квантовой ямы имеется провал в спектре, причем положения этих провалов различны для σ^+ и σ^- поляризаций, в соответствии с энергией расщепления Δ . В качестве примера рассмотрим квантовую яму на основе InGaAs и основную подзону размерного квантования двумерных тяжелых дырок, туннельно взаимодействующих со связанным состоянием дырки на акцепторе. Этот случай схематически изображен на Рис. 3.1. Двумерные дырки с проекциями углового момента $j = +3/2$ и $j = -3/2$ рекомбинируют с испусканием фотона, соответственно, правой (σ^+) или левой (σ^-) циркулярной поляризации. Как показано в §3.2, тяжелые дырки с $j = -3/2$ ($j = +3/2$) взаимодействуют с локализованными состояниями $\psi_{-\frac{3}{2}}$ ($\psi_{+\frac{3}{2}}$), соответственно. Внешнее магнитное поле, приложенное вдоль оси z , приводит к зеемановскому расщеплению энергетического уровня связанного состояния ε_0 на $\varepsilon_0^+ = \varepsilon_0 + \Delta/2$ и $\varepsilon_0^- = \varepsilon_0 - \Delta/2$. Расщепление $\Delta = \varepsilon_0^+ - \varepsilon_0^-$ также может быть вызвано эффективным магнитным полем, возникающим вследствие обменного взаимодействия дырок со спин-поляризованным

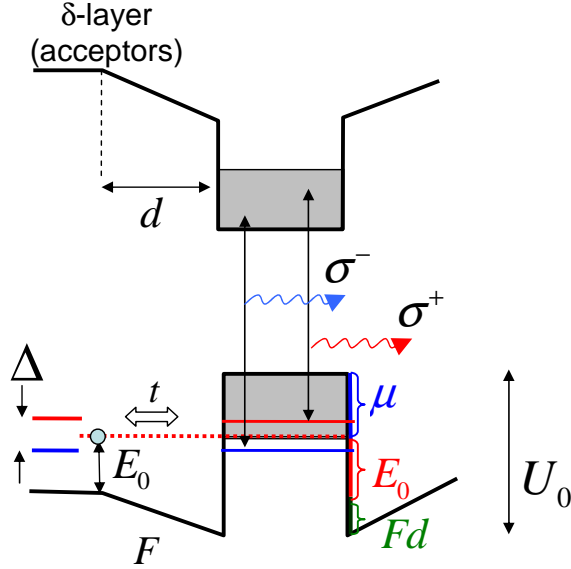


Рис. 3.1: Механизм возникновения поляризации фотолюминесценции для примеси акцепторного типа, туннельно связанной с двумерным континуумом тяжелых дырок. Локализованное состояние дырки на акцепторе расщеплено во внешнем магнитном поле. Каждый подуровень эффективно взаимодействует с соответствующей спиновой подзоной двумерных дырок. Сдвиг резонансов при учете температурного распределения дырок приводит к разным интенсивностям излучения с противоположной циркулярной поляризацией σ^+ , σ^- . Схема также демонстрирует электростатический эффект, обсуждаемый в тексте.

ионами акцептора. В частности, ионы Mn в GaAs характеризуются положительным g-фактором $g \approx 3$ [113]. Обменное взаимодействие дырки с ионом Mn является антиферромагнитным [104], поэтому уровень ε_0^+ соответствует $j = -3/2$, а ε_0^- соответствует $j = +3/2$. Как следует из (3.19), (3.28) различие положений резонансных провалов в спектре фотолюминесценции E_ω^+ и E_ω^- , соответствующих спиновым подуровням ε_0^+ и ε_0^- , дается выражением:

$$\tilde{\Delta} = E_\omega^+ - E_\omega^- = \Delta + t^2 \ln \left(1 + \frac{\tilde{\Delta}}{E_\omega^-} \right). \quad (3.31)$$

Если резонансы расположены не слишком близко к краям спектра, последним членом в (3.31) можно пренебречь и тогда $\tilde{\Delta} = \Delta = \varepsilon_0^+ - \varepsilon_0^-$. С учетом распределения электронов и дырок по энергии сдвиг положений резонансов приводит к различной интенсивности фотолюминесценции для противоположных циркулярных поляри-

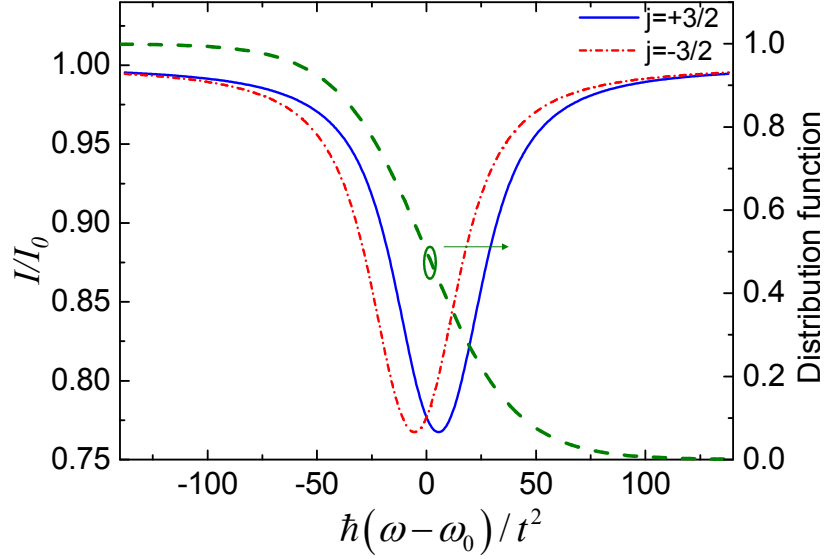


Рис. 3.2: Изменение спектра фотолюминесценции из квантовой ямы при туннельной резонансной гибридизации. Интегральная поляризация возникает когда функция распределения носителей (пунктирная линия) существенно меняется вблизи резонансов, ω_0 – положение центра резонанса в отсутствие расщепления связанного состояния.

заций. В рассматриваемом примере антиферромагнитного выстраивания дырки на Mn спектры фотолюминесценции $I^+(\hbar\omega, \tilde{\varepsilon}_0^+)$, $I^-(\hbar\omega, \tilde{\varepsilon}_0^-)$ имеют центр резонансного 'провала' при ε_0^+ и ε_0^- , соответственно, для циркулярных поляризаций σ^- и σ^+ . Согласно (3.30) различие в положениях резонансов $\Delta = \tilde{\varepsilon}_0^+ - \tilde{\varepsilon}_0^-$ приводит к интегральной поляризации спектра если функция распределения $f(E)$ заметно меняется вблизи ε_0 . Это проиллюстрировано на Рис. 3.2. Функции I^- и I^+ имеют сдвинутые положения минимумов, интегральная поляризация возникает, если функция распределения, показанная пунктирной линией заметно меняется вблизи этих минимумов. Степень интегральной поляризации определяется обычным образом:

$$P = \frac{P(\sigma^+) - P(\sigma^-)}{P(\sigma^+) + P(\sigma^-)} \approx \frac{\int_{E_g}^{\infty} I^-(\hbar\omega) d(\hbar\omega) - \int_{E_g}^{\infty} I^+(\hbar\omega) d(\hbar\omega)}{2 \int_{E_g}^{\infty} I_0(\hbar\omega) d(\hbar\omega)}$$

С учетом (3.30) получаем:

$$P = -\sqrt{n} \frac{\int_0^{\infty} \pi t^2 (E) \left[\frac{a(\tilde{\varepsilon}_0^+) \pi t^2 (E)}{\pi^2 t^4 (E) + (E - \tilde{\varepsilon}_0^+)^2} - \frac{a(\tilde{\varepsilon}_0^-) \pi t^2 (E)}{\pi^2 t^4 (E) + (E - \tilde{\varepsilon}_0^-)^2} \right] f(E) dE}{2 \int_0^{\infty} f(E) dE}. \quad (3.32)$$

Плавно меняющиеся функции $f(E)$ и $\tilde{\varepsilon}_0(E)$ в подынтегральном выражении можно заменить их значениями в $\tilde{\varepsilon}_0^-, \tilde{\varepsilon}_0^+$, туннельный параметр также будем считать константой во всем интересующем нас диапазоне $t^2(E) \equiv t^2$.

Тогда, заменяя выражения в скобках на дельта-функции, получаем:

$$P = -\frac{\sqrt{\pi} \hbar t^2 \sqrt{n} f(\varepsilon_0^+) (\varepsilon_0^+)^{-1/2} - f(\varepsilon_0^-) (\varepsilon_0^-)^{-1/2}}{2^{3/2} \sqrt{m} \int_0^{\infty} f(E) dE}. \quad (3.33)$$

В рассматриваемом случае поляризация оказывается отрицательной. Положительный знак получился бы в случае ферромагнитной связи иона акцептора с дыркой.

Установим зависимость степени циркулярной поляризации от температуры и положения уровня Ферми относительно энергии связанного состояния [A7]. Пусть волновые функции дырок гибридизованы, а волновые функции электронов зоны проводимости соответствуют невозмущенным двумерным состояниям в квантовой яме. Пусть $f^e \equiv F_e(E)$, $f^h \equiv F_h(E)$ – функции Ферми, описывающие распределения по энергии электронов и дырок, соответственно. Они характеризуются химическими потенциалами μ_e , μ_h и температурами T_e и T . Проанализируем несколько практически важных частных случаев, во всех случаях предполагается $\tilde{\varepsilon}_0 > \Delta$. Пусть дырки полностью вырождены и обе энергии $\tilde{\varepsilon}_0^-$ и $\tilde{\varepsilon}_0^+$ лежат ниже уровня квазиуровня Ферми дырок, так что $\mu_h - \tilde{\varepsilon}_0^+ \gg \Delta$. В этом случае функцию распределения дырок можно считать константой $F_h(E) = 1$ в диапазоне $E \in (\tilde{\varepsilon}_0^-, \tilde{\varepsilon}_0^+)$. Предполагая далее электроны невырожденными, получим зависимость, показанную на Рис. 3.3 (здесь эффективная температура определена как $T^* = \alpha T_e$) для различных значений параметра $\gamma \equiv \Delta/\tilde{\varepsilon}_0$. Как видно, поляризация немонотонно зависит от температуры. В рассматриваемой теории поляризация возникает из-за

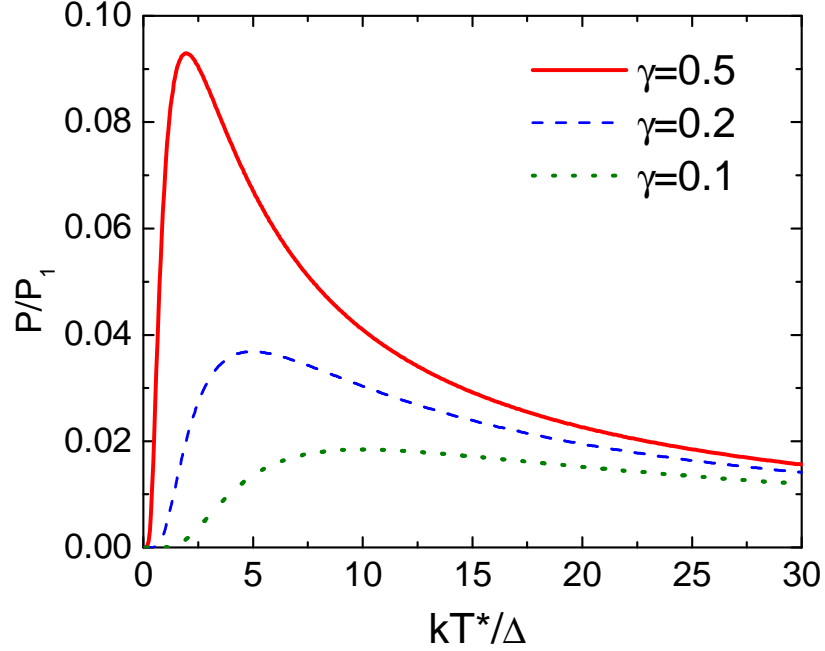


Рис. 3.3: Температурная зависимость интегральной поляризации. Электроны невырождены, дырки вырождены или имеют очень плавную функцию распределения. Расчеты приведены для различных значений параметра $\gamma \equiv \Delta/\tilde{\varepsilon}_0$. P_1 – нормировочная константа.

расщепления резонансов для σ^+ и σ^- спектров. Резонансы сами по себе лишь перераспределяют спектральную плотность, интегральная интенсивность при этом сохраняется. Для возникновения интегральной поляризации необходимо различие заполнения энергетических уровней вблизи $\tilde{\varepsilon}_0^-$ и $\tilde{\varepsilon}_0^+$. Поэтому, наибольшая интегральная поляризация возникает, когда производная комбинированной функции распределения $f(E)$ достигает максимума на интервале $E \in (\tilde{\varepsilon}_0^-, \tilde{\varepsilon}_0^+)$. Для невырожденной функции распределения максимум производной имеет место при $\tilde{\varepsilon}_0$ когда $\tilde{\varepsilon}_0 = kT^*$, и значение производной уменьшается при увеличении $\tilde{\varepsilon}_0$. Это объясняет уменьшение максимальной поляризации при уменьшении γ на Рис. 3.3. Точно такая же зависимость возникает для случая, когда и электроны и дырки невырождены. Единственное отличие от предыдущего случая заключается в том, что теперь эффективная температура T^* дается выражением

$$\frac{1}{T^*} = \left(\frac{1}{\alpha T_e} + \frac{1}{T} \right).$$

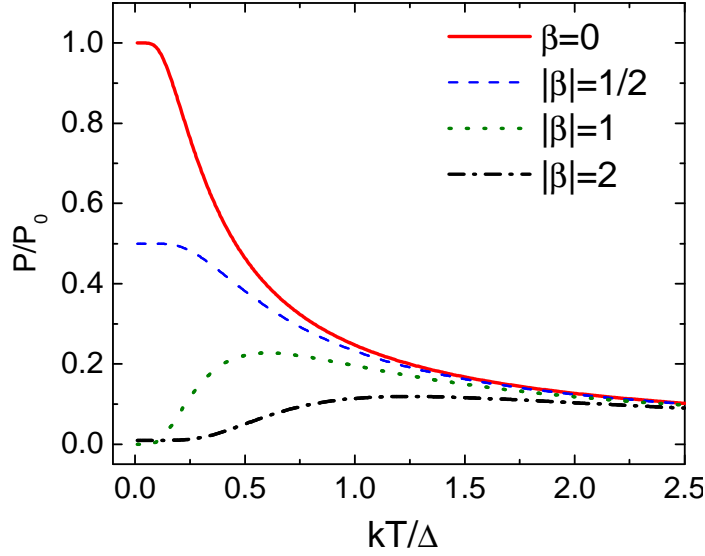


Рис. 3.4: Температурная зависимость интегральной поляризации для случая постоянной функции распределения электронов в области резонансов. Параметр $\beta \equiv \frac{\tilde{\varepsilon}_0 - \mu_h}{\Delta}$ определяет расстояние от уровня Ферми дырок до резонансного уровня, $\gamma = 0.1$. P_0 – нормировочная константа.

Теперь рассмотрим случай, когда функция распределения электронов F_e практически постоянна в области резонансов. Такая ситуация, в частности, отвечает неравновесной функции распределения электронов с большой энергией Ферми или достаточно высокой электронной температурой T_e . Дырки теперь будем считать имеющими произвольное распределение Ферми с химическим потенциалом μ_h и температурой T . Будем считать $kT \ll \tilde{\varepsilon}_0$. Зависимость степени поляризации от температуры, полученная по формуле (3.33) для этого случая приведена на Рис.3.4 для различных значений параметра β (значение γ положено 0.1). В этом случае максимум производной функции распределения имеет место при μ_h , поэтому наибольшая степень интегральной поляризации соответствует $\beta = 0$.

3.5 Электростатический эффект

Рассмотренный механизм возникновения спиновой поляризации носителей в квантовой яме основан на резонансном туннелировании, а выражение для степени по-

ляризации фотолюминесценции содержит туннельный параметр. Поэтому, разумно ожидать чрезвычайно сильную зависимость степени циркулярной поляризации от расстояния d между δ -слоем магнитной примеси и квантовой ямой (т.е. от толщины спейсера). Однако, экспоненциальная зависимость степени спиновой поляризации от толщины барьера оказывается ослабленной из-за электростатического эффекта, схематически проиллюстрированного на Рис. 3.1 и рассматриваемого ниже более подробно. Для простоты будем полагать, что функция распределения электронов является константой в области резонансов, а функция распределения дырок описывается распределением Ферми-Дирака с химическим потенциалом μ и температурой T . В отсутствие внешней оптической накачки дырки в квантовой яме находятся в термодинамическом равновесии с акцепторами в примесном слое и имеют общий химический потенциал. В условиях слабой оптической накачки значительная концентрация дырок в квантовой яме меняется слабо, поэтому можно считать, что квазиуровни Ферми дырок в примесном слое и в квантовой яме по-прежнему совпадают, так что $\varepsilon_0 = \mu$. Строго говоря, это справедливо для нерасщепленного примесного уровня. Если примесный уровень расщеплен, так что $\varepsilon_0^+ - \varepsilon_0^- = \Delta$, следует считать $\varepsilon_0^- = \mu$. Из (3.33) получим следующее упрощенное выражение:

$$P = -\frac{\sqrt{\pi}\hbar t^2\sqrt{n}}{2^{5/2}\sqrt{m'_{hh}}\mu^{3/2}} \operatorname{th} \frac{\Delta}{2kT} \quad (3.34)$$

Как будет показано ниже, как t , так и μ дают вклад в зависимость степени интегральной поляризации P от толщины спейсера d и глубины квантовой ямы U_0 . Дырки в квантовой яме создают электрический заряд с поверхностной плотностью $\sigma = eN\mu$, где e – элементарный заряд, N – двумерная плотность состояний. Положительно заряженная плоскость квантовой ямы и отрицательно заряженная плоскость примесного слоя, содержащего частично ионизованные акцепторы разделены расстоянием d и создают электрическое поле

$$F = \frac{4\pi eN\mu}{\varepsilon}, \quad (3.35)$$

где ε – диэлектрическая проницаемость материала. Электрическое поле F приводит к тому, что край валентной зоны в области примесного слоя Mn оказывается смещен относительно края валентной зоны в непосредственной близости от квантовой ямы на величину $F \cdot d$. Поскольку квазиуровень Ферми акцепторов находится выше локального положения края валентной зоны на величину энергии связи E_0 , условие равенства квазиуровней Ферми приводит к простому уравнению (см. Рис.3.1) :

$$U_0 = \mu + E_0 + eFd, \quad (3.36)$$

где U_0 – глубина квантовой ямы, μ – химический потенциал дырок в квантовой яме. С учетом (3.35) получаем :

$$\mu = \frac{U_0 - E_0}{1 + \frac{4\pi Ned}{\varepsilon}} \approx \frac{(U_0 - E_0) \varepsilon}{4\pi Ned}. \quad (3.37)$$

Чтобы оценить зависимость туннельного параметра t от параметров квантовой ямы и спейсера, рассмотрим туннелирование через барьер трапецевидной формы в квазиклассическом приближении (см. Рис. 3.1). Принимая во внимание (3.15) и (3.37), приходим к следующему выражению (полагаем $\mu \ll U_0$):

$$t^2 \sim \exp(-\kappa d), \quad (3.38)$$

где

$$\kappa = \frac{4\sqrt{2m_{lh}}}{3\hbar(U_0 - E_0)} \left(U_0^{3/2} - E_0^{3/2} \right) \quad (3.39)$$

Из (3.34), (3.38), (3.39), (3.37) следует зависимость степени интегральной поляризации от толщины спейсера:

$$P \sim d^{3/2} \exp(-\kappa d), \quad (3.40)$$

Заметим, что электростатический эффект приводит к зависимости μ от d , так что зависимость P от d становится не чисто экспоненциальной, она имеет ослабляющий предэкспоненциальный фактор $d^{3/2}$. Зависимость предэкспоненциального множителя от d может показаться несущественной на фоне экспоненциальной

зависимости, но в действительности, при актуальных для экспериментальной ситуации значениях показателя экспоненты вплоть до $\kappa d \approx 2 - 3$ это ослабление оказывается весьма существенным.

3.6 Сравнение с экспериментальными данными

В рассмотренной теории циркулярная поляризация излучения из квантовой ямы возникает из-за спинового расщепления примесного состояния и, поэтому, может значительно превышать поляризацию, обусловленную собственным g-фактором носителей в квантовой яме. При этом мы считали внешнее магнитное поле неквантовым. Оценка для расстояния между уровнями Ландау даёт:

$$\hbar\omega_c = \frac{e\hbar B}{m'_{hh}c} \approx 0.3 \text{ мЭВ}$$

для магнитного поля $B = 0.5 \text{ Т}$. Эта величина значительно меньше характерной кинетической энергии дырок, оцениваемой как $\varepsilon \approx 1 - 10 \text{ мЭВ}$. Однако, эта величина может быть сравнима с туннельным параметром. Поэтому, с экспериментальной точки зрения применимость рассмотренной теории ограничена магнитными полями $B \lesssim 0.5 \text{ Т}$. Резонансная туннельная связь приводит к провалу в спектре люминесценции, это означает, что в такой схеме знак поляризации излучения из квантовой ямы оказывается обратным по отношению к оптическим переходам между связанным состоянием на примеси и делокализованными состояниями в барьере. В частности, резонансно-туннельная гибридизация двумерных тяжелых дырок с акцепторными состояниями Mn, рассмотренная в §3.4 приводит к отрицательному знаку поляризации. Этот результат противоречит экспериментальным данным [109, 114], где наблюдалась положительная циркулярная поляризация. Причина этого расхождения может быть в том, что главный вклад в наблюдаемую поляризацию происходит не от равновесных дырок, а от неравновесных электронов, такой механизм рассмотрен в Главе 4. Другая возможность заключается в том, что описание связанного состояния дырки на Mn является существенно неполным. В частности, мы не учитывали кулоновские корреляции, т.е.

невозможность присутствия двух дырок на одном ионе Mn. Учет этих корреляций может привести к смене знака поляризации на противоположный.

Выполним численную оценку степени циркулярной поляризации, возникающей вследствие туннельно-резонансной гибридизации. Будем полагать примесный уровень достаточно глубоким (имея в виду Mn в GaAs) $E_0 = 100$ мэВ, толщина барьера $d = 5$ нм, толщина квантовой ямы $a = 10$ нм. Для эффективной массы электрона в GaAs $m = 0.06 m_0$ для простой зоны согласно выражению для туннельного параметра (3.6) получим $(t^e)^2 \approx 2$ мэВ. Оценка для величины туннельного параметра в случае дырок оказывается значительно меньше, так для масс тяжелой дырки $m_{hh} = 0.5 m_0$, $m'_{hh} = 0.15 m_0$ из (3.15) получаем $(t^h)^2 \sim 0.01$ мэВ. Степень поляризации оцениваем согласно (3.33). Положим $\Delta = 1$ мэВ, $T_e = T_h = 20$ К, поверхностная концентрация примесей $n = 10^{13}$ см $^{-2}$. Тогда для примеси донорного типа $t = t^e$, $\varepsilon_0 = 4$ мэВ, $\mu_h = -1$ мэВ, $\mu_e = \varepsilon_0^-$, получим $|P| \approx 40\%$, для примеси акцепторного типа $t = t^h$, $\mu_e = -1$ мэВ, $\varepsilon_0 = 2$ мэВ, $\mu_h = \varepsilon_0^-$ дает $|P| \approx 0.5\%$. Пример рассчитанных спектров люминесценции для двух противоположных циркулярных поляризаций приведен на Рис. 3.5. В расчете использовано промежуточное значение для туннельного параметра $t^2 = 0.3$ мэВ ($|P| \approx 0.15\%$) и учтено неоднородное уширение спектра в меру нормального распределения ширины запрещенной зоны E_g с дисперсией $\sigma = 3$ мэВ (что соответствует флуктуациям толщины квантовой ямы на пол-монослоя). На Рис. 3.6 приведено сравнение результатов расчета согласно разработанной теории с указанными выше параметрами с экспериментальными данными, полученными в группе [106]. Для различных значений расстояния от квантовой ямы до примесного слоя d при одном и том же наборе остальных параметров рассчитанные спектры хорошо согласуются с экспериментальными данными для образцов с различной толщиной спейсера. Слабая зависимость степени поляризации от толщины спейсера является следствием электростатического эффекта, изложенного в § 3.5.

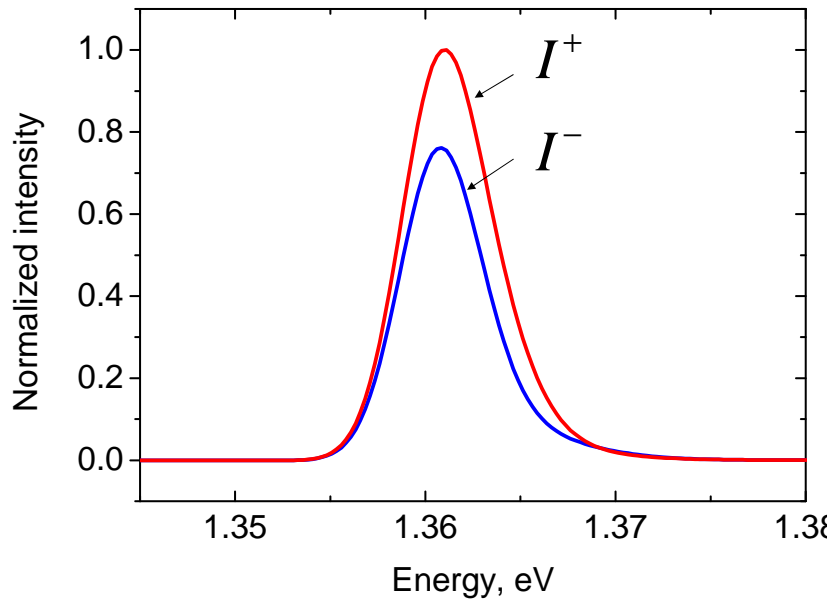


Рис. 3.5: Пример расчета спектров фотолюминесценции для двух циркулярных поляризаций. В случае антиферромагнитного выстраивания дырки по отношению к магнитному иону I^- соответствует поляризации σ^+ , а I^+ соответствует поляризации σ^- . Параметры расчета приведены в тексте.

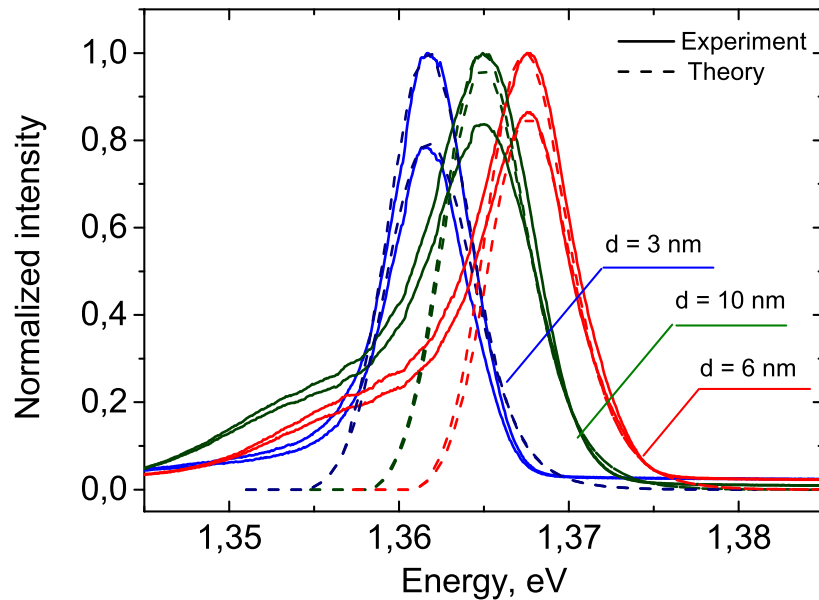


Рис. 3.6: Сравнение теоретических и экспериментальных спектров фотолюминесценции для образцов с различной толщиной барьера (спейсера), отделяющего квантовую яму от примесного слоя Mn. Толщина спейсера изменяется от 3 нм (синяя кривая) до 10 нм (зеленая кривая). Приложенное в эксперименте внешнее магнитное поле $B = 0.3T$.

3.7 Краткие итоги

В Главе 3 получены следующие основные результаты:

- Разработана теория резонансной туннельной гибридизации примесного состояния с континуумом двумерных делокализованных состояний в квантовой яме в полупроводниковых гетероструктурах.
- Проанализировано влияние гибридизации на прямые оптические переходы в квантовой яме. Показано, что гибридизация приводит к провалу в спектральной плотности фотолюминесценции вблизи энергии примесного состояния.
- Предложен механизм возникновения циркулярной поляризации фотолюминесценции из квантовой ямы за счет резонансно-туннельной гибридизации с пространственно отделенными примесными состояниями, расщепленными по спину в магнитном или эффективном обменном поле.

Глава 4

Спин-зависимая туннельная рекомбинация в гетероструктурах

4.1 Введение

Идея управления спиновой поляризацией в полупроводниковых системах получила мощный импульс после открытия разбавленных магнитных полупроводников со сравнительно высокой температурой Кюри ферромагнитного фазового перехода [102, 104]. Ограниченные возможности объемных образцов, а именно, невозможность достичь комнатной температуры Кюри сместили фокус исследований к низкоразмерным полупроводниковым гетероструктурам, в которых магнитный слой и квантовая яма разделены промежуточной буферной областью (спейсером) [98, 115, 116]. Такая геометрия, с одной стороны, сохраняет транспортные и оптические свойства квантовой ямы на высоком уровне, а с другой создает возможность управления спиновой поляризацией в квантовой яме за счет магнитного слоя. Один из наиболее ярких эффектов влияния магнитного слоя на состояния носителей в квантовой яме заключается в циркулярной поляризации фотолуминесценции. При этом степень поляризации повторяет поведение намагниченности магнитного слоя: во внешнем магнитном поле наблюдался гистерезис поляризации [107, 109].

Физическое явление, рассматриваемое в данной главе заключается в возникновении неравновесной спиновой поляризации электронов или дырок в квантовых

ямах или квантовых точках за счет спин-зависимого ухода носителей вследствие туннелирования. При этом, из-за разных скоростей ухода носителей с противоположными проекциями спина, в изначально неполяризованном по спину ансамбле электронов или дырок возникает спиновая поляризация. Эта поляризация, в свою очередь, легко детектируется оптическими методами, например, при излучательной рекомбинации носителей в квантовой яме или квантовой точке. Характерные времена ухода могут быть очень малыми, в том числе значительно меньше времени излучательной рекомбинации, поэтому временная динамика наблюдаемых оптических свойств будет сверхбыстрой, т.е. с характерным временем меньшим, чем время излучательной рекомбинации. Спин-зависимая рекомбинация с учетом спин-спинового взаимодействия на парамагнитных центрах изучалась в ряде работ (см., например [117, 118, 119] и ссылки в этих работах). В настоящей главе исследуется спин-зависимая рекомбинация с учетом туннелирования, которая приводит к возникновению динамической спиновой поляризации в квантовой яме за счет рекомбинации на примесных центрах, пространственно отделенных от квантовой ямы потенциальным барьером. При этом теоретически рассматриваются две ситуации. В первом случае имеет место резонансное туннелирование на спин-расщепленные подуровни примесного центра, и генерация спиновой поляризации происходит в меру разной заселенности резонансных уровней в квантовой яме для противоположных проекций спина. Второй, нерезонансный случай имеет место, когда спин-расщепленный примесный уровень лежит выше заполненных состояний электронов в квантовой яме и играет роль промежуточного состояния в двух-этапном когерентном процессе спин-зависимой рекомбинации электрона из квантовой ямы с дыркой в примесном слое.

Развитая теория применяется для описания экспериментов по детектированию фотолюминесценции с временным разрешением в гетероструктурах на основе InGaAs с квантовой ямой и магнитным слоем Mn [114, 120]. Похожие структуры, описаны также в Главе 3 в рамках обсуждения механизма оптической циркулярной

поляризации, за счет туннельной гибридизации равновесных носителей в квантовой яме. Как будет показано в настоящей главе, преобладание того или иного механизма в наблюдаемой поляризации фотолюминесценции в этих структурах главным образом связано с положением уровня Ферми электронов. При большой плотности оптической накачки или малой глубине квантовой ямы для электронов преобладает динамический механизм поляризации, обсуждаемый в настоящей главе. Развитая в настоящей главе теория описывает быстрое гашение интенсивности фотолюминесценции, а также объясняет наблюдаемое в эксперименте линейное со временем нарастание циркулярной поляризации излучения из квантовой ямы в магнитном поле [A14],[A19].

Схематически постановка задачи о туннельной спин-зависимой рекомбинации проиллюстрирована на Рис.4.1. Система представляет собой полупроводниковую гетероструктуру, содержащую квантовую яму и слой легирующей примеси (для определенности будем рассматривать примесь донорного типа), отстоящий от квантовой ямы на расстояние, допускающее туннелирование электронов между донорным уровнем и квантовой ямой. Пусть в начальный момент времени кван-

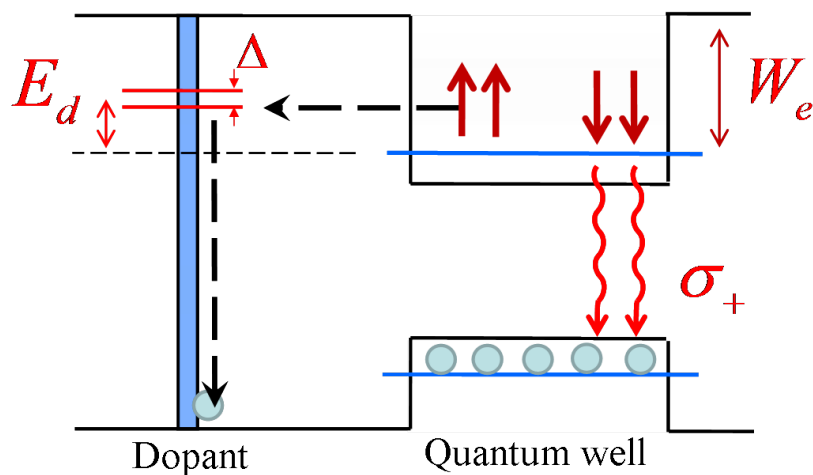


Рис. 4.1: Схема спин-зависимой туннельной рекомбинации, случай резонансного туннелирования.

товая яма заполнена электронами, неполяризованным по спину. Предполагается, что электроны могут туннелировать на донорный уровень, причем скорость тако-

го туннелирования зависит от спина электрона. Зависимость скорости туннельной рекомбинации от проекции спина частицы возникает вследствие расщепления примесного уровня на спиновые подуровни, характеризуемые энергией ε_s и проекцией спина s :

$$\varepsilon_s = E_d - s\Delta, \quad (4.1)$$

где E_d - энергия примесного уровня в отсутствие расщепления, Δ - величина расщепления (Рис. 4.1). Уход носителей с различной проекцией спина s из квантовой ямы происходит по двум различным каналам, через состояния с разной энергией ε_s . Если темп туннельной рекомбинации через эти каналы оказывается различным, то в яме будет генерироваться спиновая поляризация. Расщепление Δ может быть обусловлено обменным взаимодействием, внешним магнитным полем или спин-орбитальным взаимодействием [118]. В частности, если примесные центры являются парамагнитным, обменное взаимодействие электрона или дырки, локализованных на центре с неспаренными электронами внутренних оболочек приводит к расщеплению (4.1), где Δ определяется константой обменного взаимодействия α и величиной спина магнитного центра J : $\Delta = \alpha J$. Такая ситуация, в частности, имеет место для слоя примеси Mn в гетероструктуре на основе GaAs [A14]. В зависимости от положения в решетке GaAs, Mn может формировать либо акцепторное (примесь замещения Mn_{Ga}) либо донорное (междоузельное положение Mn_I) состояние [121, 104]. При концентрации Mn несколько объемных процентов такой примесный слой становится ферромагнитным. Ферромагнитный порядок возникает среди атомов Mn, которые являются примесью замещения и находятся в положении Ga (Mn_{Ga}). В этой конфигурации Mn является акцептором с энергией связи дырки $E_a \approx 110$ мэВ [104]. Атом Mn также может располагаться в междоузельном положении (Mn_I). В этой конфигурации Mn_I формирует донорное состояние, а также является центром быстрой безызлучательной рекомбинации [122]. Ферромагнетизм в слое возникает вследствие косвенного обмена между ионами Mn_{Ga} через слаболокализованные дырки в слое, а также через свобод-

ные дырки в квантовой яме [A11], [A13]. Если акцепторный уровень Mn_{Ga} лежит в зоне разрешенных состояний дырок в квантовой яме (гетероструктуры с достаточно глубокой квантовой ямой), возникает резонансная туннельная гибридизация состояний свободной дырки в квантовой яме с локализованным состоянием на акцепторном уровне [A10], это приводит к равновесной спиновой поляризации дырок в яме и, по-видимому, является причиной циркулярной поляризации фотолюминесценции в структурах с глубокими квантовыми ямами при умеренных плотностях оптической накачки [109], [A8]. В гетероструктурах с более мелкой квантовой ямой акцепторное состояние лежит вне резонанса и не обеспечивает эффективную спиновую поляризацию дырок в квантовой яме за счет Mn_{Ga} , с другой стороны, более мелкая квантовая яма для электронов и более высокие плотности накачки приводят, как показывает эксперимент, к тому, что циркулярная поляризация фотолюминесценции становится существенно динамическим эффектом, в котором главную роль играют донорные уровни центров Mn_I [120, 114]. Электрон, находясь на донорном уровне Mn_I -центра, вовлечен в обменное взаимодействие с d^5 электронами внутренней оболочки Mn_I , что проявляется в расщеплении донорного состояния по спину электрона, это приводит к зависимости от спина скорости безызлучательной рекомбинации через такой центр [A14], [A19]. Как показывают расчеты, безызлучательная рекомбинация электронов через донорные центры Mn_I приводит к быстрой временной зависимости интенсивности и циркулярной поляризации излучения из квантовой ямы. Результаты расчётов хорошо согласуются с экспериментальными данными [A14].

4.2 Теория спин-зависимой туннельной рекомбинации

Будем рассматривать полупроводниковую гетероструктуру, содержащую квантовую яму и слой легирующей примеси донорного типа, отстоящий от квантовой ямы на расстояние, допускающее туннелирование электронов между донорным

уровнем и квантовой ямой (Рис.4.1). Теория справедлива также и в случае, когда примесный уровень акцепторного типа, а туннелируют дырки. Возможны два принципиально различных случая. В первом случае в квантовой яме имеются электроны с энергией, соответствующей энергии донорного уровня, так что туннелирование является резонансным. Во втором случае резонансное туннелирование невозможно вследствие несовпадения энергии носителей в квантовой яме и энергии примесного уровня. Рассмотрим последовательно оба случая.

4.2.1 Резонансный случай

Для выполнения условия резонансного туннелирования донорный уровень E_d должен лежать достаточно глубоко, т.е. вблизи положения первого уровня размерного квантования электронов в квантовой яме (Рис.4.1). В этом случае возможно резонансное туннелирование электронов из квантовой ямы на донорное состояние. Будем считать, что последующая безызлучательная рекомбинация происходит некогерентно по отношению к процессу туннелирования и, тем самым, имеется два независимых процесса: резонансное туннелирование на донорный уровень, безызлучательная рекомбинация с дыркой валентной зоны. Каждому процессу соответствует определенное время, так что общий темп ухода электрона из квантовой ямы по этому каналу будет определяться самым длинным временем. Будем считать, что время безызлучательной рекомбинации короче характерного времени туннелирования, поэтому динамическое влияние заселённости донорных уровней на скорость ухода незначительно, такая ситуация характерна для примесных центров Mn_I в низкотемпературном GaAs [122]. В такой модели генерация спина происходит в результате резонансного туннелирования из-за различия резонансных энергий для противоположных проекций спина (аналогично примеру, рассмотренному в §1.1.3). В соответствии с методом туннельного гамильтониана (§1.2) запишем гамильтониан системы с учетом туннелирования следующим об-

разом:

$$\begin{aligned}
H &= H_d + H_{QW} + H_T \\
H_d &= \sum_s \varepsilon_s a_s^\dagger a_s \\
H_{QW} &= \sum_s \int \varepsilon_k b_{ks}^\dagger b_{ks} d\Gamma_k \\
H_T &= \sum_s \int (t_k a_s^\dagger b_{k,s} + h.c.) d\Gamma_k,
\end{aligned}$$

где $a_s, b_{ks}, a_s^\dagger, b_{ks}^\dagger$ - операторы рождения и уничтожения электрона, соответственно на донорном уровне и в квантовой яме, $d\Gamma_k \equiv Sd^2\mathbf{k}/(2\pi)^2$, S -нормировочная площадь. Гамильтониан H_d описывает связанное состояние электрона на доноре с энергией ε_s и учитывает обменное расщепление (4.1) состояния по проекции спина s электрона. В качестве начала отсчета энергии принято положение дна первой подзоны размерного квантовая электронов. H_{QW} описывает свободное движение электронов в плоскости квантовой ямы, $\varepsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$ - соответствующая кинетическая энергия, m - эффективная масса в плоскости квантовой ямы. В этой главе как волновые функции локализованного состояния, так и волновые функции состояний в квантовой яме имеют единичную нормировку на объём, площадь квантовой ямы полагается равной S . Слагаемое H_T описывает туннелирование между состояниями в квантовой яме и донорным уровнем, характеризуемое туннельным параметром t_k . Будем считать, что расщепление Δ примесного уровня по проекции спина на ось z , перпендикулярную плоскости квантовой ямы (4.1), вызвано эффективным обменным полем. Отметим, что для возникновения такого расщепления к образцу должно быть приложено внешнее магнитное поле вдоль оси z , однако это поле, выстраивающее магнитные моменты ферромагнитного слоя примеси, может быть слабым [114], так что эффектом Зеемана для электронов в квантовой яме можно пренебречь. Формализм метода туннельного гамильтониана позволяет вычислить туннельный параметр t_k , исходя из вида волновых функций, описывающих состояния, между которыми происходит туннелирование. Для сферически

симметричного локализованного состояния на доноре в §3.2 получено выражение для туннельного параметра (3.6), в случае нормировки волновой функции в яме на площадь, имеем:

$$t_k = \sqrt{\frac{1}{2aq \left(1 + \frac{k^2}{q^2}\right)}} \sqrt{E_d} \frac{\hbar}{\sqrt{mS}} e^{-qd}, \quad (4.2)$$

где $q = \sqrt{2m_{\perp}E_d/\hbar^2}$, m_{\perp} - эффективная масса в барьере в направлении туннелирования, d - ширина барьера.

Рассмотрим генерацию спиновой поляризации. Пусть изначально в квантовой яме имеется определенная концентрация электронов, полученная, например с помощью неполяризованного импульса оптической накачки. Скорость туннелирования из интервала состояний в квантовой яме $d\Gamma_k$ вблизи ε_k на примесный центр дается золотым правилом Ферми:

$$d\omega_{\mathbf{k}s} = \frac{2\pi}{\hbar} t_k^2 \delta(\varepsilon_s - \varepsilon_k) d\Gamma_k. \quad (4.3)$$

$d\Gamma_{\mathbf{k}} = Sd^2\mathbf{k}/(2\pi)^2$. Плотность туннельного тока определяется согласно

$$j_s = en_i \int f_s(\mathbf{k}) d\omega_{\mathbf{k}s}, \quad (4.4)$$

где $f_s(\mathbf{k})$ - функция распределения электронов со спином s в квантовой яме, n_i - двумерная концентрация примесных центров. При вычислении туннельного тока полагаем, что донорные состояния всегда свободны (быстрая безызлучательная рекомбинация). Концентрация фотовозбужденных электронов в квантовой яме мала, и электронный газ электронный газ можно считать невырожденным:

$$f_s(\mathbf{k}) = \exp\left(\frac{\mu_s - \varepsilon_k}{k_B T_e}\right), \quad (4.5)$$

здесь μ_s - химический потенциал электронов с проекцией спина s , k_B - постоянная Больцмана, T_e - электронная температура. Подставляя (4.2) (зависимостью от k пренебрегаем) в (4.3) и далее в (4.4) получим:

$$j_s = e\gamma_s n_s, \quad \gamma_s = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{\tau^2}{k_B T_e} e^{-2qd} \exp\left(-\frac{\varepsilon_s}{k_B T_e}\right), \quad (4.6)$$

где n_s - полная концентрация электронов с проекцией спина s в квантовой яме, γ_s - скорость ухода электронов в результате туннелирования, τ - параметр, имеющий размерность энергии:

$$\tau = \sqrt{\frac{n_i}{aq^3}} E_d.$$

В рамках резонансной схемы генерация спина в квантовой яме происходит в меру разной заселенности уровней в квантовой яме с энергиями, соответствующими спин-расщепленным донорным подуровням. Даже при одинаковой начальной концентрации электронов с разными спинами (случай неполяризованного импульса накачки $\mu_{+1/2} = \mu_{-1/2}$), имеется спиновый туннельный ток из квантовой ямы в примесный слой:

$$q_z \equiv (j_{+1/2} - j_{-1/2})/e = q_0 \sinh\left(\frac{\Delta}{2k_B T_e}\right) \quad (4.7)$$

$$q_0 = n e^{-2qd} \frac{\pi \tau^2}{\hbar k_B T_e} e^{-E_d/k_B T_e},$$

здесь $n = n_{+1/2} + n_{-1/2}$ - концентрация электронов в квантовой яме. Из формулы (4.7) видно, что в случае положительного обменного поля ($\Delta > 0$), туннелирование электронов с $s = +1/2$ происходит более интенсивно и приводит к накоплению отрицательного спина в квантовой яме.

4.2.2 Нерезонансный случай

Если состояния в квантовой яме с энергиями примесных состояний ε_s незаполнены, прямое резонансное туннелирование из в квантовой ямы в примесный слой невозможно. В этом случае донорный уровень может играть роль промежуточного состояния в двух-этапном когерентном процессе безызлучательной рекомбинации электрона из квантовой ямы с дыркой в примесном слое (Рис. 4.2). Поскольку интеграл перекрытия волновых функций электрона в яме с дыркой в примесном слое чрезвычайно мал, то темп рекомбинации с прыжком на промежуточный донорный уровень оказывается гораздо выше, чем прямая безызлучательная рекомбинация.

Тем самым рассматриваемый процесс может определять всю кинетику спиновой генерации в яме.

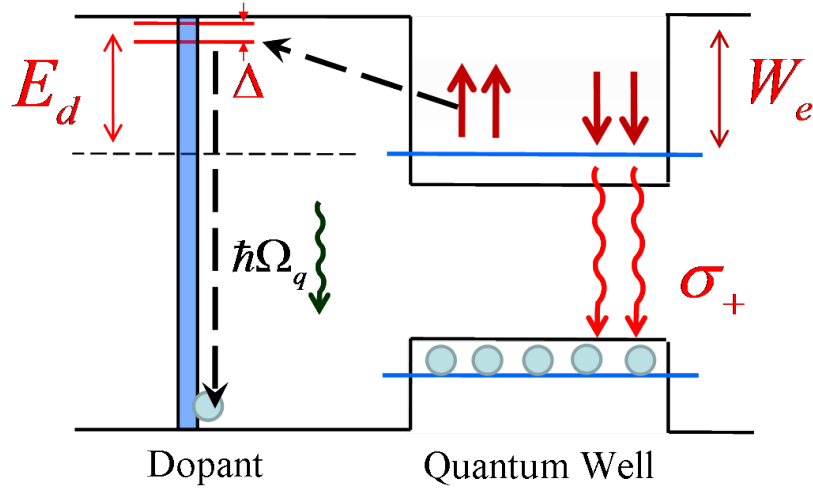


Рис. 4.2: Схема двух-этапной рекомбинации через промежуточное спин-расщепленное состояние на доноре.

Рассмотрим двух-этапный процесс, в котором начальное состояние соответствует нахождению электрона в квантовой яме с энергией $\varepsilon_k = \hbar^2 k^2 / 2m$, где m - эффективная масса в плоскости, конечное состояние описывает электрон в валентной зоне в примесном слое и испущенный фонон с энергией $\hbar\Omega_q$, а испускание оптического фонона происходит в промежуточном состоянии, когда электрон виртуально протуннелировал на донорный уровень ε_s . Матричный элемент такого перехода вычисляется во втором порядке теории возмущений. Скорость переходов в единицу времени, соответственно, дается:

$$d\omega_{\mathbf{k},s}^q = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \frac{V_q t_k}{\varepsilon_k - \varepsilon_s} \right|^2 \delta(\varepsilon_k + E_{rec} - \hbar\Omega_q) d\Gamma_k d\nu_q, \quad (4.8)$$

где V_q - матричный элемент электрон-фононного взаимодействия, $d\nu_q$ - плотность состояний фононов, E_{rec} - разница энергий между уровнем размерного квантования ямы и потолком валентной зоны в барьере, t_k - туннельный матричный элемент (4.2).

После интегрирования (4.8) по фоновым степеням свободы, получаем

$$d\omega_{\mathbf{k},s} = \frac{1}{\tau_d} \frac{t_k^2}{(\varepsilon_k - E_d + s\Delta)^2} d\Gamma_k, \quad (4.9)$$

где введено время жизни электрона на донорном состоянии

$$\frac{1}{\tau_d} = \frac{2\pi}{\hbar} \int d\nu_{\mathbf{q}} |V_q|^2 \delta(E_{rec} - \hbar\Omega_{\mathbf{q}}).$$

Зависимостью τ_d от k можно пренебречь, когда $\varepsilon_k \ll E_{rec}$. Подставляя (4.9) и (4.5) в (4.4) получаем для плотности туннельного тока

$$j_s = e \frac{\tau^2 e^{-2qd}}{\tau_d} \frac{n_s}{k_B T_e} \int_0^\infty \frac{e^{-\varepsilon_k/k_B T_e}}{(\varepsilon_k - E_d + s\Delta)^2} d\varepsilon_k. \quad (4.10)$$

Считая глубину квантовой ямы существенно большей энергии ионизации донора и электронной температуры, так что $k_B T_e \ll E_d$ (Рис.4.2), в (4.10) разложим предэкспоненциальный множитель в подынтегральном выражении:

$$\frac{1}{(\varepsilon_k - E_d + s\Delta)^2} = \frac{1}{(s\Delta - E_d)^2} - \frac{2\varepsilon_k}{(s\Delta - E_d)^3} + o\left(\frac{\varepsilon_k}{E_d}\right)$$

и получим выражение (во втором члене разложения пренебрежем $s\Delta$):

$$j_s = e\gamma_s n_s, \quad \gamma_s = \frac{\tau^2 e^{-2qd}}{\tau_d} \frac{1}{(E_d - s\Delta)^2} \left[1 + \frac{2k_B T_e}{E_d} \right], \quad (4.11)$$

где n_s - двумерная концентрация электронов с проекцией спина s в квантовой яме, γ_s - темп рекомбинации электронов с соответствующей проекцией спина. Заметим, что, хотя γ_s содержит в знаменателе достаточно большую энергию E_d , эта малость отчасти компенсируется коротким времени жизни τ_d , что приводит к значительной скорости безызлучательной рекомбинации в целом.

В отличие от резонансной схемы, скорость спиновой генерации не зависит от электронной температуры. В данном случае спиновое расщепление донорного уровня приводит к зависимости от спина (4.9) скорости самого микроскопического процесса безызлучательной рекомбинации фотовозбужденных электронов.

Рассматривая, как и в предыдущем разделе, случай неполяризованной накачки ($\mu_{+1/2} = \mu_{-1/2}$), выпишем выражение для туннельного спинового тока:

$$q_z = n \frac{e^{-2qd}}{\tau_d} \frac{2\tau^2 \Delta}{E_d^3}, \quad (4.12)$$

n - полная концентрация электронов в квантовой яме. В положительном внешнем магнитном поле, в квантовой яме будет по-прежнему наблюдаться накопление отрицательной спиновой поляризации. Заметим, что если квантовая яма достаточно мелкая, а электронная температура достаточно высока, так что $T_e \sim E_d$, возникает зависимость туннельного тока от электронной температуры за счет второго слагаемого в квадратной скобке (4.11).

4.2.3 Резонансный и нерезонансный вклады, зависимость от температуры

Обе рассмотренные в работе схемы приводят к генерации спиновой поляризации в квантовой яме. Какая из них реализуется в эксперименте, зависит от соотношения между энергией примесного уровня E_d и электронной температурой T_e . Резонансный механизм, связанный с различной заселенностью состояний в квантовой яме с энергиями донорных подуровней, экспоненциально подавляется при $E_d \gg k_B T_e$. Когда резонансный канал подавлен, основную роль играют нерезонансные переходы. В противоположной ситуации $E_d \sim k_B T_e$ резонансный и нерезонансный механизмы имеют место одновременно. При этом вклад нерезонансных переходов в полный темп туннельного ухода оказывается меньше. Действительно, отношение (4.6) к (4.11) будет содержать большой параметр $E_d \tau_d / \hbar \gg 1$, связанный с тем, что донорный уровень E_d хорошо определен и его уширение из-за безызлучательной рекомбинации \hbar / τ_d слабое. На Рис. 4.3 приведены зависимости скорости туннельной рекомбинации от соотношения $k_B T_e / E_d$ (в расчете полагалось $E_d \tau_d / \hbar = 10$). Видно, что при $k_B T_e \gtrsim 0.7 E_d$ резонансный вклад является доминирующим. Поэтому, в случае когда в квантовой яме имеются носители с энергией донорного уровня, основной вклад в темп опустошения будет связан именно с резонансным

туннелированием.

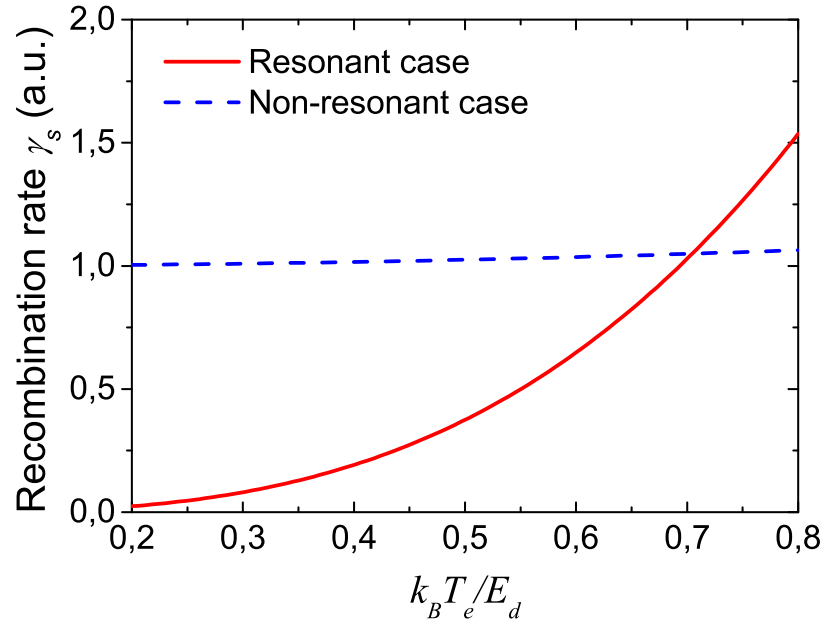


Рис. 4.3: Зависимость скорости туннельной безызлучательной рекомбинации от электронной температуры

С экспериментальной точки зрения доминирующий механизм туннельной рекомбинации может быть идентифицирован по зависимости эффекта от электронной температуры. Для данного положения донорного уровня резонансная схема крайне чувствительна к электронной температуре, в то время как нерезонансный канал зависит от температуры слабо ((4.11) (зависимостью же времени жизни τ_d от температуры можно пренебречь)). Однако, при значительном увеличении электронной температуры, особенно в мелких ямах, следует ожидать увеличения скорости рекомбинации. Кроме того, эффективность нерезонансной туннельной рекомбинации увеличивается с уменьшением E_d .

4.3 Спин-зависимая туннельная рекомбинация в гетероструктурах (Ga,Mn)As

4.3.1 Расчет временной зависимости интенсивности и циркулярной поляризации

Применим развитую теорию спин-зависимой туннельной рекомбинации для анализа экспериментов по фотолюминесценции с временным разрешением в гетероструктурах на основе $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ с мелкой p -легированной квантовой ямой и и легирующим слоем Mn, отстоящим от квантовой ямы на 3-5 нм [120, 114]. В этих экспериментах наблюдалось сверхбыстрое гашение фотолюминесценции из квантовой ямы после прохождения одиночного неполяризованного импульса накачки. При этом одновременно наблюдался линейный по времени рост циркулярной поляризации излучения. Структура является p -легированной, наличие исходной высокой концентрации равновесных дырок в квантовой яме означает, что после прохождения импульса накачки поведение фотолюминесценции во времени связано с кинетикой неравновесных электронов: интенсивность I и степень циркулярной поляризации ρ_c фотолюминесценции определяются концентрациями электронов в квантовой яме n_s :

$$I = n_{+1/2} + n_{-1/2} \quad \rho_c = \frac{n_{-1/2} - n_{+1/2}}{n_{+1/2} + n_{-1/2}}, \quad (4.13)$$

где мы учли, что циркулярная поляризация σ^+ отвечает излучательной рекомбинации электрона с проекцией спина $-1/2$ с тяжелой дыркой с проекцией углового момента $+3/2$ (подзона легких дырок отщеплена в силу размерного квантования).

Рассмотрим кинетику неравновесных фотовозбужденных электронов. Наиболее быстрым процессом является установление квазиравновесной функции распределения $f_s(\mathbf{k})$ электронов с определенной электронной температурой T_e и химическим потенциалом μ_s . Дальнейшие процессы, приводящие к изменению концентрации носителей, описываются с помощью зависящего от времени μ_s . Время жизни электрона в квантовой яме определяется процессами туннелирования в примесный

слоей и излучательной рекомбинацией с дырками в квантовой яме. Излучательная электрон-дырочная рекомбинация в обсуждаемых структурах является достаточно медленным процессом с характерным временем $\tau_{\text{rad}} \sim 10$ нс. Релаксация спина неравновесных электронов в исследованных образцах оказывается также медленным процессом. В [120] показано, что спин неравновесных электронов не успевает полностью исчезнуть за время жизни носителей, тем самым время спиновой релаксации оказывается $\tau_s \geq \tau_{\text{rad}}$. Процесс туннелирования является быстрым на фоне времен $\tau_s, \tau_{\text{rad}}$. Тем самым спин-зависимое туннелирование будет приводить к возникновению электронной спиновой поляризации, существующей на масштабе времен вплоть до τ_s .

Рассматривая временную эволюцию фотOLUMИНЕСЦЕНЦИИ на ранней стадии (до τ_s), можно использовать кинетические уравнения для каждого спина по отдельности, пренебрегая перемешиванием $n_{+1/2}$ с $n_{-1/2}$ и, тем самым, не учитывая релаксацию спиновой поляризации:

$$\frac{dn_s}{dt} = -j_s/e - \frac{n_s}{\tau_{\text{rad}}} = -\gamma_s n_s - \frac{n_s}{\tau_{\text{rad}}}. \quad (4.14)$$

В нулевой момент времени концентрации электронов с противоположными проекциями спина равны: $n_{+1/2}(0) = n_{-1/2}(0) = n_0/2$. На начальном этапе временной эволюции концентрация электронов убывает экспоненциально:

$$n_s(t) = \frac{n_0}{2} e^{-\Gamma_s t}, \quad (4.15)$$

с характерным временем жизни электрона в квантовой яме $\Gamma_s^{-1} = (\gamma_s + \tau_{\text{rad}}^{-1})^{-1} \approx \gamma_s^{-1}$. Спин-зависимый уход электронов приводит к спиновой поляризации

$$\rho_c = \text{th} \left(\frac{\delta\Gamma}{2} t \right) \quad \delta\Gamma = \gamma_{-1/2} - \gamma_{+1/2}, \quad (4.16)$$

которая линейно нарастает на малых временах. Следует заметить, что туннелирование электронов приводит также к аккумуляции заряда в квантовой яме. Оценим величину этого заряда, считая что в случае импульсной оптической накачки оценкой сверху будет начальная концентрация электронов n_0 после прохождения

импульса. При длительности импульса $\tau_0 = 1$ пс и максимальной мощности накачки $P_0 \approx 40$ мВт [114] при энергии кванта $\hbar\omega \approx 1.4$ эВ и площади пятна засветки $S_0 \approx 0.01$ мм² получим:

$$n_0 = \frac{P_0\tau}{\hbar\omega S_0} \approx 10^9 \text{ см}^{-2}$$

. Эта концентрация по крайне мере на 2 порядка меньше характерных значений равновесной концентрации дырок [114], так что с электростатической точки зрения этот заряд не оказывает заметного влияния на процесс туннелирования.

4.3.2 Сравнение с экспериментальными данными

Темп туннельного ухода γ_s определяется формулой (4.6), если туннелирование носит резонансный характер, или выражением (4.11) для двух-этапной рекомбинации. Какая из этих схем реализуется в конкретной структуре зависит от положения донорного уровня. В рассматриваемой гетероструктуре донорные состояния образованы ионами марганца в междоузельной конфигурации Mn_I . В настоящее время нет надежных экспериментальных данных об энергии донорного уровня Mn_I в GaAs. Численные расчеты указывают, что этот уровень лежит вблизи дна зоны проводимости GaAs, или даже попадает в нее [123]. Расстояние от первого уровня размерного квантования до донорного состояния в гетероструктурах InGaAs оказывается порядка 50 мэВ, что заметно превышает электронную температуру фотовозбужденных электронов [A14]. Поэтому, для описания этих экспериментов следует применять нерезонансную схему, туннельный ток определяется выражением (4.11).

На Рис.4.4,4.5 представлена кинетика фотолюминесценции после прохождения неполяризованного импульса накачки (экспериментальные данные – точки, теоретические кривые – линии) для структур с различной толщиной спейсера ($d = 5, 10$ нм).

В расчете учтены известные характеристики исследуемой гетероструктуры $\tau = 13$ мэВ, $W_e = 45$ мэВ, $m_{\perp} = 0.065m_0$, время жизни электрона на донорном

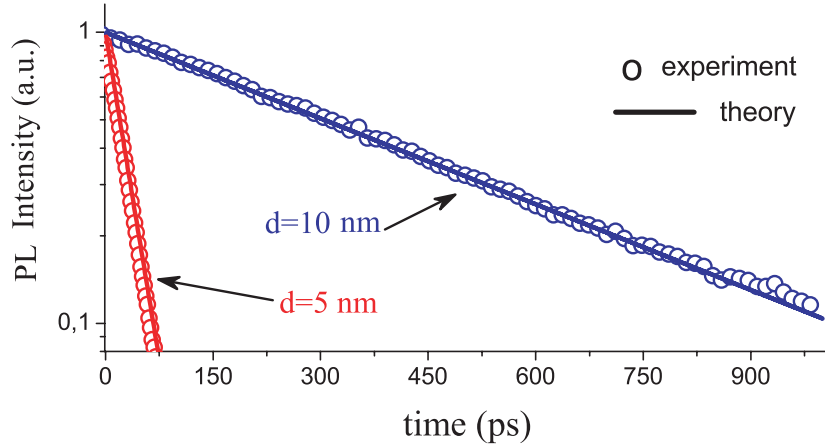


Рис. 4.4: Временная зависимость интенсивность фотолюминесценции из квантовой ямы.

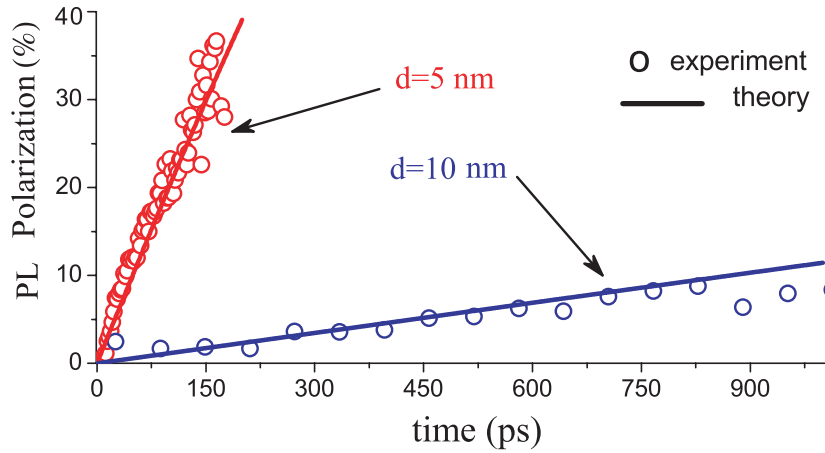


Рис. 4.5: Временная зависимость поляризации фотолюминесценции из квантовой ямы.

уровне полагалось $\tau_d = 0.5$ пс в соответствии с [122]. Два параметра являлись подгоночными: $E_d = 47$ мэВ, $\Delta = 2.5$ мэВ. Как видно из Рис. 4.4, 4.5, расчет очень хорошо согласуется с экспериментальными данными, при этом наилучшее значение энергии донорного уровня $E_d = 47$ мэВ, т.е. имеет место нерезонансный случай, донорный уровень лежит на границе зоны проводимости (глубина квантовой ямы для электронов в исследуемых образцах составляла $W_e \approx 45$ мэВ. Такое положение донорного уровня соответствует ионам Mn в междоузельной конфигурации [106, 123], Время гашения интенсивности фотолюминесценции оказывается значительно меньше времени излучательной рекомбинации, так что $\Gamma_s^{-1} \approx \gamma_s^{-1}$). Резкая

зависимость фотолюминесценции от толщины спейсера d связана с туннельной экспонентой $\gamma_s \sim e^{-2qd}$: чем ближе расположен примесный слой, тем быстрее идет туннелирование. Различие в туннельных коэффициентах $\gamma_{+1/2} \neq \gamma_{-1/2}$ приводит к возникновению спиновой поляризации электронов и циркулярной поляризации фотолюминесценции, которая на данных временных масштабах линейно растет со временем, в согласии с экспериментом. Таким образом, расчет качественно и количественно объясняет гашение фотолюминесценции и линейный рост поляризации с характерным временем на несколько порядков меньше времени излучательной рекомбинации. В результате сравнения теоретических и экспериментальных данных получено значение для энергии донорного уровня Mn_I : 2 мэВ выше края зоны проводимости и величины обменного расщепления донорного уровня $\Delta = 2.5$ мэВ.

4.3.3 Вклады динамической поляризации и поляризации равновесных носителей

Кроме динамической поляризации электронов, рассмотренной в данной главе, в гетероструктурах, содержащих квантовую яму на основе InGaAs и ферромагнитный слой Mn, имеется равновесная поляризация дырок в квантовой яме. В частности, дырки в квантовой яме обеспечивают вклад в косвенное обменное взаимодействие между ионами Mn, рассматриваемое в Главе 5. Поэтому, естественно предположить наличие вклада в циркулярную оптическую поляризацию фотолюминесценции из квантовой ямы, связанного со спиновой поляризацией дырок [99, 109]. Такой механизм рассмотрен в Главе 3. В реальных гетероструктурах реализуются оба механизма, причем доминирование одного из них обусловлено параметрами структуры и параметрами эксперимента. Так, рассмотренный в настоящей главе механизм динамической поляризации электронов в нерезонансном случае довольно резко зависит от глубины квантовой ямы для электронов W_e . Действительно, при положении донорного уровня вблизи края зоны проводимости имеем $E_d \approx W_e$ (Рис.4.2). Из (4.16) и (4.11) имеем для величины $\delta\Gamma$, определяющей спиновую по-

ляризацию

$$\delta\Gamma \sim \frac{1}{E_d^3}.$$

Например, при $E_d \approx 45$ мэВ изменение глубины ямы на 10 мэВ ведет к уменьшению $\delta\Gamma$ более чем в 2 раза. Кроме того, температурная поправка в (4.11) оказывается существенной при высокой температуре электронов или при достаточно высоком уровне накачки. Так, при увеличении электронной температуры до $k_B T_e \approx 10$ мэВ степень поляризации увеличивается в 1.5 раза по сравнению с $T_e \approx 0$. Таким образом, в более мелких ямах и большей мощности оптической накачки, создающей распределение электронов с высокой температурой, механизм динамической спиновой поляризации за счет спин-зависимой туннельной рекомбинации становится более значительно эффективным. И наоборот, в более глубоких ямах и низкой температуре электронов динамическая спиновая поляризация электронов уменьшается. При этом равновесная поляризация дырок, наоборот, может возрасти за счет резонансной туннельной связи с примесным слоем (см. Главу 5), в целом это ведет к подавлению механизма динамической спиновой поляризации электронов и усилению механизма возникновения циркулярной поляризации за счет спиновой поляризации равновесных дырок.

4.4 Краткие итоги

В Главе 4 получены следующие основные результаты:

- Описан механизм резонансно-туннельной спин-зависимой рекомбинации в полупроводниковых гетероструктурах с магнитным примесным слоем.
- Показано, что спин-зависимое туннелирование из квантовой ямы на примесные уровни в слое магнитных примесей приводит к накоплению спиновой поляризации в квантовой яме и циркулярной поляризации фотолюминесценции.

- Предложено теоретическое описание с учетом резонансной или нерезонансной туннельной связи квантовой ямы с примесным слоем и безызлучательной рекомбинации носителей заряда в примесном слое.
- Расчеты позволили качественно и количественно объяснить экспериментально наблюдаемые особенности фотолюминесценции из гетероструктур на основе InGaAs с квантовой ямой с пространственно отделенным слоем Mn, в частности гашение фотолюминесценции и линейный рост поляризации с характерным временем на несколько порядков меньше времени излучательной рекомбинации.
- В результате сравнения теоретических и экспериментальных данных получено значение для энергии донорного уровня Mn_I : 2 мэВ выше края зоны проводимости и величины обменного расщепления донорного уровня $\Delta = 2.5$ мэВ.

Глава 5

Резонансное косвенное обменное взаимодействие в полупроводниковых гетероструктурах

5.1 Введение

5.1.1 Обменное взаимодействие

Обменное взаимодействие ответственно за формирование дальнего магнитного порядка в веществах и лежит в основе магнетизма в твердотельных материалах [124, 125]. Обменное взаимодействие возникает в системе тождественных частиц в квантовой механике, приводящее к зависимости значения энергии системы частиц от её полного спина. Если гамильтониан системы не содержит явной зависимости от спина частицы, волновая функция, являющаяся решением соответствующего уравнения Шредингера, записывается как произведение координатной части и спиновой части. Для тождественных фермионов волновая функция должна быть антисимметрична по отношению к перестановкам частиц. Поэтому, возникают две различные возможности - либо координатная часть антисимметрична, а спиновая симметрична, либо симметричной является спиновая часть, а координатная является антисимметричной по отношению к перестановкам частиц. Средние значения полной энергии, вычисленные на этих различных волновых функ-

ций могут быть различны, как правило вследствие кулоновского взаимодействия. Это различие в энергии волновых функций с противоположными симметриями координатной и спиновой частей и интерпретируется как обменное взаимодействие [126, 15]. Более того, хотя различие в энергии, вызванное кулоновскими и кинетическими слагаемыми в гамильтониане возникает из-за разного вида координатной части волновой функции, обменное взаимодействие удобно записывать как эффективное взаимодействие спинов. На самом деле никакого прямого взаимодействия нет, но из-за жесткой связи спиновой координатной частей волновой функции описание в терминах эффективного спин-спинового взаимодействия оказывается наиболее удобным.

Рассмотрим наиболее простой и наиболее важный случай парного взаимодействия [127, 126]. Пусть гамильтониан системы двух частиц не зависит явно от спина частиц и не содержит взаимодействия между ними, т.е. имеет следующий вид:

$$\hat{H} = \hat{H}_a + \hat{H}_b, \quad (5.1)$$

где \hat{H}_a , \hat{H}_b – одночастичные гамильтонианы, описывающие состояние первой и второй частицы. Например,

$$\hat{H}_a = \frac{\hat{p}_1^2}{2m} + U_a(\mathbf{r}_1) \quad \hat{H}_b = \frac{\hat{p}_2^2}{2m} + U_b(\mathbf{r}_2), \quad (5.2)$$

где $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ – координаты первой и второй частицы, \hat{p}_1, \hat{p}_2 – операторы импульса для первой и второй частицы, соответственно. Для тождественных фермионов полная волновая функция должна быть антисимметрична по отношению к перестановке частиц. При этом имеются две возможности. В первом случае координатная часть симметрична, а спиновая часть – антисимметрична. Для двух частиц со спином 1/2 в отсутствие взаимодействия между ними эти части записываются в следующем

виде:

$$\begin{aligned}\Psi_S &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(\mathbf{r}_1) \psi_b(\mathbf{r}_2) + \psi_a(\mathbf{r}_2) \psi_b(\mathbf{r}_1)] \\ \chi_S &= \frac{1}{\sqrt{2}} [|\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 - |\downarrow\rangle_2 |\uparrow\rangle_1] \quad S = 0; S_z = 0\end{aligned}\quad (5.3)$$

Здесь ψ_a, ψ_b – собственные функции гамильтонианов \hat{H}_a, \hat{H}_b (5.1). Такое состояние называется синглетным (это отмечено индексом S), антисимметричная спиновая часть соответствует полному спину $S = 0$, и оно невырождено по проекции спина $S_z = 0$. Другая возможность реализации антисимметричной полной волновой функции соответствует антисимметричной координатной части и симметричной спиновой части. Это триплетное состояние (индекс T):

$$\begin{aligned}\Psi_T &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(\mathbf{r}_1) \psi_b(\mathbf{r}_2) - \psi_a(\mathbf{r}_2) \psi_b(\mathbf{r}_1)] \\ \chi_{T1} &= |\downarrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 \quad S = 1; S_z = -1 \\ \chi_{T2} &= \frac{1}{\sqrt{2}} [|\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 + |\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2] \quad S = 1; S_z = 0 \\ \chi_{T3} &= |\uparrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 \quad S = 1; S_z = 1\end{aligned}\quad (5.4)$$

Симметричная спиновая часть соответствует полному спину $S = 1$, и имеется три различных состояния, отвечающих проекциям спина на ось z : $S_z = 0, \pm 1$. Для гамильтониана (5.1) среднее значение энергии состояний (5.3) и (5.4) одинаково. Если, однако, имеется взаимодействие между частицами, не зависящее явно от спина, так что

$$\hat{H} = \hat{H}_a + \hat{H}_b + U_{int}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (5.5)$$

тогда собственные функции гамильтониана (5.5) приобретают более сложный вид (оставаясь, конечно симметричными или антисимметричными по отношению к перестановке частиц), а спиновая часть остаётся такой же, как указано в (5.3), (5.4). При этом, средние значения энергии для триплетного и синглетного состояний

могут различаться:

$$\begin{aligned}
 E_S &= \langle \Psi_S | \hat{H} | \Psi_S \rangle \\
 E_T &= \langle \Psi_T | \hat{H} | \Psi_T \rangle \\
 E_S &\neq E_T
 \end{aligned} \tag{5.6}$$

В первом порядке теории возмущений разность энергий синглетного и триплетного состояний равна:

$$E_S^{(1)} - E_T^{(1)} = 2 \int \psi_a^*(\mathbf{r}_1) \psi_b^*(\mathbf{r}_2) \hat{H} \psi_a(\mathbf{r}_2) \psi_b(\mathbf{r}_1) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \tag{5.7}$$

Поскольку синглетное и триплетное состояния характеризуются различными значениями полного спина и, при этом, вследствие различной координатной части волновой функции, имеют разные энергии, можно составить эффективный гамильтониан обменного взаимодействия:

$$\hat{H} = \frac{1}{4} (E_S + 3E_T) - (E_S - E_T) \hat{\mathbf{S}}_1 \hat{\mathbf{S}}_2, \tag{5.8}$$

где $\hat{\mathbf{S}}_1, \hat{\mathbf{S}}_2$ – операторы спина первой и второй частицы, соответственно. Собственными функциями такого гамильтониана являются состояния с определенным полным спином, т.е. собственным значением оператора $\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}}_1 + \hat{\mathbf{S}}_2$. При этом состояние с $S = 0$ имеет энергию E_S , а состояние с $S = 1$ – энергию E_T , поэтому такой эффективный гамильтониан описывает обменное взаимодействие. Не содержащую спиновые операторы часть удобно отнести к невзаимодействующей части гамильтониана, она ведет просто к сдвигу энергии, тогда приходим к модели Гейзенберга [128]:

$$\begin{aligned}
 \hat{H} &= \hat{H}_0 - 2J \hat{\mathbf{S}}_1 \hat{\mathbf{S}}_2 \\
 J &= \frac{E_S - E_T}{2},
 \end{aligned} \tag{5.9}$$

здесь H_0 - гамильтониан системы без учета обменного взаимодействия, J – обменная константа, При $J > 0$ наимизшим по энергии является триплетное состояние, то есть ферромагнитному (параллельному) упорядочению спинов, такое

взаимодействие реализуется, например в частично заполненных атомных орбиталях и объясняет правило Хунда [15], в случае $J < 0$ основное состояние - синглет, соответствующее антипараллельной конфигурации спинов. Такая ситуация возникает при доминировании кинетического обмена, т.е. когда главный вклад в разность $E_S - E_T$ возникает из-за разных средних значений оператора кинетической энергии для синглетного и триплетного состояний [129], типичным примером является ковалентная химическая связь в молекуле водорода [15, 129]. Как видно из (5.7), обменное взаимодействие возникает при непосредственном перекрытии одночастичных волновых функций. В этом случае говорят о прямом обмене. Обменное взаимодействие также возможно при участии частицы-посредника, через которую происходит взаимодействие, в этом случае имеет место косвенный обмен [130, 127]. Прямое обменное взаимодействие экспоненциально затухает с увеличением расстояния между магнитными центрами, в то время как косвенное обменное взаимодействие может распространяться на значительные расстояния, спадая по абсолютной величине степенным образом. Существуют различные микроскопические механизмы косвенного обменного взаимодействия [126], одним из важнейших является косвенное обменное взаимодействие магнитных ионов через свободные носители заряда, так называемое взаимодействие Рудермана-Киттеля-Касуя-Йосиды (РККИ) [131, 132, 133].

5.1.2 Косвенное обменное взаимодействие через свободные носители

РККИ-взаимодействие играет важнейшую роль для магнитных материалов, в которых большое расстояние между магнитными ионами или дефектами, обладающими магнитным моментом, заведомо исключает непосредственное перекрытие волновых функций локализованных состояний. Косвенное обменное взаимодействие, аналогичное РККИ, но отличающееся тем, что переносчиком обменного взаимодействия являются слабо-локализованные состояния, формально относится к механизму двойного обмена [126, 127]. РККИ взаимодействие и двойной обмен

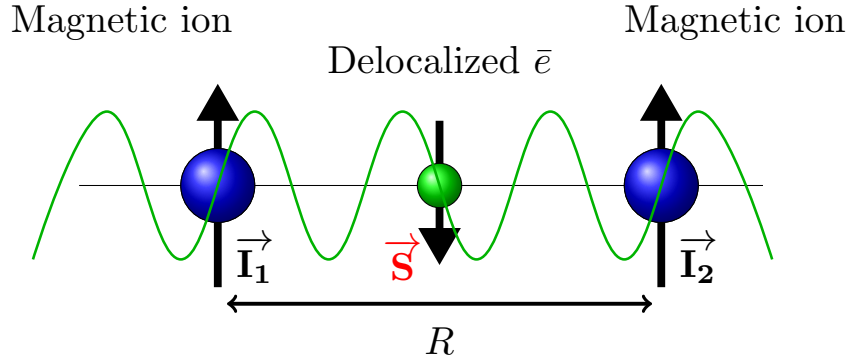


Рис. 5.1: Схема РККИ-взаимодействия

через слаболокализованные носители ответственны за магнетизм в разбавленных магнитных полупроводниках [103], причем в некоторых случаях, например, для объемных полупроводников (Ga,Mn)As до сих пор ведутся споры, имеет ли место РККИ обмен через свободные дырки валентной зоны или двойной обмен через слаболокализованные состояния вблизи края валентной зоны, детали остаются невыясненными [104]. Для явления резонансного косвенного обмена, обсуждаемого в настоящей главе, ключевую роль играет РККИ-взаимодействие, понимаемое в широком смысле как косвенный обмен через делокализованные состояния.

Схематически РККИ взаимодействие проиллюстрировано на Рис. (5.1). Два магнитных иона, обладающие спиновыми моментами $\mathbf{I}_1, \mathbf{I}_2$ благодаря частично заполненной атомной орбитали, расположены на расстоянии R , значительно превышающем характерный радиус затухания волновой функции локализованного состояния электрона на ионе. При наличии в системе делокализованных электронных состояний волновая функция делокализованного электрона со спином S перекрывается с волновыми функциями локализованных состояний на ионах, таким образом возникает обменное взаимодействие электрона с каждым из магнитных ионов. Соответствующий вклад в гамильтониан записывается в виде [134]:

$$H_J = J\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_1)\hat{\mathbf{I}}_1\hat{\mathbf{S}} + J\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_2)\hat{\mathbf{I}}_2\hat{\mathbf{S}}, \quad (5.10)$$

где $\mathbf{R}_{1,2}$ – координаты ионов, $\hat{\mathbf{I}}_{1,2}, \hat{\mathbf{S}}$ – операторы спина для ионов и делокализо-

ванного электрона, соответственно, J – обменная константа. Стандартный подход к нахождению энергии системы в зависимости от конфигурации спинов магнитных ионов состоит в решении задачи по теории возмущений, это и есть теория РККИ [134]. Поправка к энергии, связанная с конфигурацией спинов магнитных ионов $\Delta E_{I_1 I_2}$ возникает во втором порядке теории возмущений, причем следует просуммировать по всем заполненным делокализованным состояниям, поскольку каждый свободный электрон вносит вклад в энергию косвенного обмена:

$$\Delta E_{I_1 I_2} = P \sum_{s, s'} \int_0^{k_F} d\mathbf{k} \int_{k_F}^{\infty} d\mathbf{k}' \frac{\langle \mathbf{k} s I_1 I_2 | \hat{H} | \mathbf{k}' s' I_1 I_2 \rangle \langle \mathbf{k}' s' I_1 I_2 | \hat{H} | \mathbf{k} s I_1 I_2 \rangle}{E_{\mathbf{k}} - E_{\mathbf{k}'}} , \quad (5.11)$$

здесь состояние системы “магнитные ионы+электрон” характеризуется волновым вектором электрона \mathbf{k} , проекцией спина электрона s и проекциями спинов ионов I_1, I_2 . При нулевой температуре заполнены состояния с энергией от 0 до энергии Ферми E_F , которой соответствует величина волнового вектора k_F . Как обычно, во втором порядке теории возмущений при суммировании по промежуточным состояниям следует исключить слагаемое $k = k'$, в непрерывном случае это означает интегрирование в смысле главного значения (обозначенное символом P), при этом оказывается, что при вычислении двойного интеграла в (5.11) следует соблюдать аккуратность в выборе порядка интегрирования [134]. Энергия косвенного обменного взаимодействия магнитных ионов в теории РККИ оказывается пропорциональной $J^2 \mathbf{I}_1 \mathbf{I}_2$ и осциллирует в зависимости от R . Ниже приведены результаты расчета для случаев разных размерностей [135]:

$$\begin{aligned} 1D : E &= J^2 \mathbf{I}_1 \mathbf{I}_2 \frac{m}{2\pi \hbar^2} F_{1D} (2k_F R) \\ 2D : E &= J^2 \mathbf{I}_1 \mathbf{I}_2 \frac{m^2 E_F}{4\pi \hbar^4} F_{2D} (2k_F R) \\ 3D : E &= J^2 \mathbf{I}_1 \mathbf{I}_2 \frac{2m^3 E_F^2}{\pi^3 \hbar^6} F_{3D} (2k_F R) , \end{aligned} \quad (5.12)$$

где F_{iD} , $i = 1, 2, 3$ – функции, осциллирующие с расстоянием между магнитными

ионами.

$$\begin{aligned}F_{1D}(x) &= \text{si}(x) \\F_{2D}(2x) &= J_0(x)Y_0(x) + J_1(x)Y_1(x) \\F_{3D}(x) &= \frac{x \cos x - \sin x}{x^4},\end{aligned}\tag{5.13}$$

$\text{si}(x)$ - интегральный синус, $J_{0,1}, Y_{0,1}$ - функции Бесселя и Неймана соответствующих порядков. На Рис. 5.2 приведены осциллирующие функции $F_{iD}(x)$, содержащиеся в выражениях для энергии косвенного обмена.

5.1.3 Косвенный обмен в гетероструктурах (Ga,Mn)As

Полупроводники, слабо легированные парамагнитными примесями, так называемые разбавленные магнитные полупроводники (РМП) в последнее время чрезвычайно активно исследуются экспериментально и теоретически. Такие материалы, в принципе, предоставляют возможности совмещения полупроводниковой технологии и элементной базы с магнитными свойствами вещества, в частности возможности задействования спиновой степени свободы в приборах полупроводниковой спинтроники [121]. Настоящим прорывом в этой области явилось открытие РМП (Ga,Mn)As с относительно высокой температурой Кюри [102]. Механизм, ответственный за ферромагнитные свойства GaAs, легированного небольшим количеством Mn не вполне ясен [103], считается, что ферромагнетизм возникает благодаря косвенному обмену через свободные или слабо-локализованные дырки примесной зоны [104]. Максимальная температура Кюри достигнутая в этих материалах на сегодняшний день составляет $T_C \approx 200$ К [104]. Дальнейшему повышению температуры Кюри препятствует предел растворимости Mn в GaAs, не позволяющий получать однородные объемные образцы с высокой степенью легирования [136].

В этой связи особенный интерес представляют гетероструктуры, в которых слой Mn отделен от двумерного канала (квантовой ямы), заполненного дырками [137, 116, 138, 115]. Как показывают эксперименты, гетероструктуры на основе

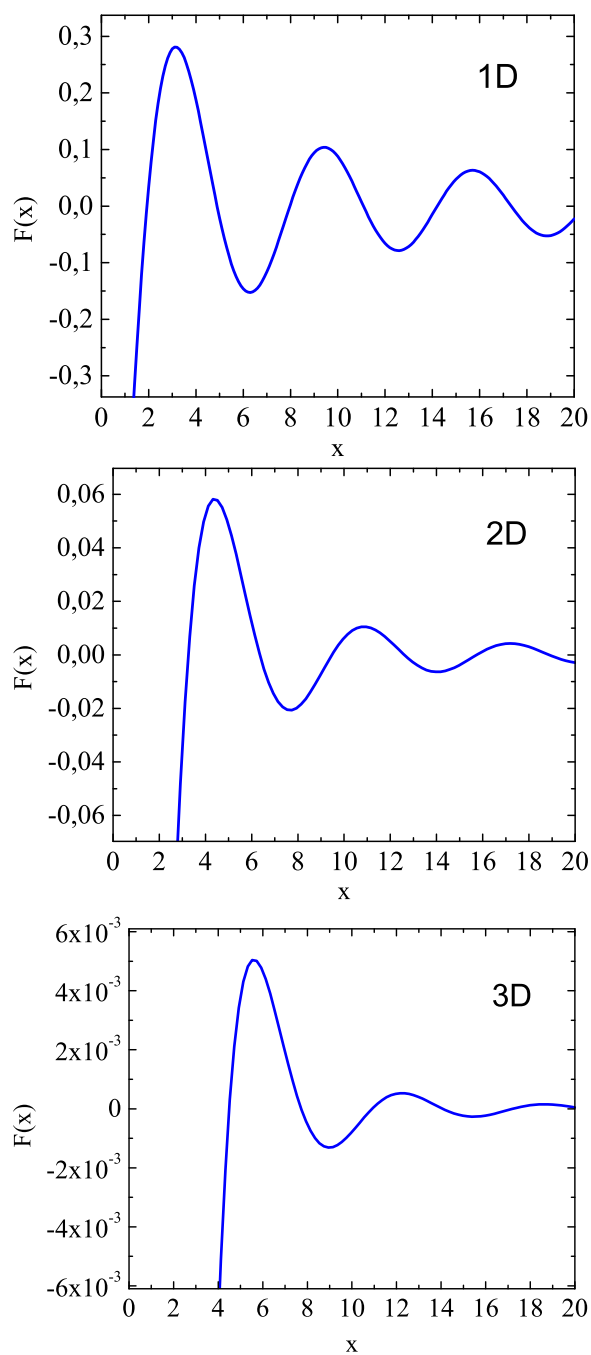


Рис. 5.2: Осциллирующая часть РККИ-взаимодействия в разных размерностях

GaAs с δ -слоем Mn, расположенным вблизи $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ квантовой ямы обладают ферромагнитными свойствами, схожими с объемным (Ga,Mn)As [139, 115]. При этом, однако, оказалось, что ферромагнитные свойства немонотонно зависят от глубины квантовой ямы [140]. Анализ параметров этих гетероструктур GaAs/InGaAs/Mn показывает, что возрастание температуры Кюри при некоторой оптимальной глубине квантовой ямы происходит при попаданием энергии связанного состояния дырки на ионе Mn в энергетический диапазон заполненных состояний квантоворазмерной подзоны тяжелых дырок $hh1$ в квантовой яме [A11]. При этом становится возможным эффективное резонансное туннелирование двумерных дырок из квантовой ямы на связанное состояние на ионе марганца. Качественно ясно, что резонансная туннельная связь дырок в квантовой яме с магнитными ионами создаёт возможность для косвенного обмена между ионами Mn через дырки в двумерном канале. При этом возникает задача о теоретическом описании такого косвенного обмена. При нерезонансной туннельной связи косвенный обмен описывается стандартной теорией РККИ и подавлен в меру затухания волновой функции свободных двумерных носителей в потенциальном барьере, отделяющем магнитные ионы. Возможным обобщением на резонансный случай могла бы быть замена волновых функций двумерных дырок на волновые функции, гибридные с локализованным уровнем дырки на Mn (см. §1.4) и использовании теории возмущений РККИ. Такой подход рассмотрен в [A9]. Оказывается, что в общем случае при вычислении энергии косвенного обмена возникают расходимости, и это связано с неприменимостью теории возмущений при изменении волновой функции под влиянием возмущения. Изменения волновых функций состояний вблизи резонанса под действием возмущения не являются малыми. Другой подход к вычислению энергии косвенного обмена, хорошо развитый для одномерных многослойных магнитных систем, заключается в точном решении одночастичной задачи о движении электрона в потенциале, создаваемым магнитными ионами, причем спиновая конфигурация ионов является параметром потенциала. Разность энергий

электрона для параллельной и антипараллельной спиновой конфигурации ионов интерпретируется как энергия косвенного обмена [141, 142, 143]. Такая постановка задачи устойчива к резонансным явлениям, поскольку не использует теорию возмущений. Теория резонансного косвенного обмена, развиваемая в настоящей главе, основывается на этом подходе.

5.1.4 Непертурбативное вычисление косвенного обмена

Задача об обменном взаимодействии для системы из двух магнитных ионов и электронного газа с взаимодействием, описываемым (5.10) в общем случае является проблемой Кондо с двумя примесями (two-impurity Kondo problem) [144]. Спин каждого электрона связан с двумя спинами ионов и сохраняющейся величиной является только суммарный спин двух ионов и всех электронов. В случае сильной обменной связи косвенное обменное взаимодействие между ионами подавляется за счёт экранирования спина каждого иона электронами [145, 146]. В случае слабой обменной связи, т.е. когда обменная константа J мала, возникает косвенное обменное взаимодействие, обычно описываемое как возмущение с помощью теории РККИ. В диссертации рассматривается случай, когда обменная константа J мала по сравнению с энергией Ферми электронного газа E_F и, в конечном итоге, мала поправка к энергии электронного газа, но при этом изменение гибридной волновой функции и её части в пространственной области квантовой ямы под действием возмущения не является малым из-за резонансной туннельной связи электронного газа с магнитными ионами (что вызывает расходимости в вычислениях по теории возмущений). В этом случае полный спин свободных носителей в основном состоянии близок к нулю, в противном случае с учетом принципа Паули поправка к энергии электронного газа была бы порядка E_F , поэтому можно считать, что суммарный спин магнитных ионов $\mathbf{I}_1 + \mathbf{I}_2$ практически сохраняется. Тогда собственные состояния системы ионов классифицируются по полному моменту в интервале $0..2I$, где I – собственное значение спинового момента магнитного иона. Тогда энергию взаимодействия ионов можно вычислить, учитывая

спины магнитных ионов классически, как разность энергий между состоянием с полным спином равным нулю и полным спином равным $2I$, т.е. разность энергий для антипараллельной и параллельной конфигураций классических магнитных моментов ионов [124]. Поскольку гамильтониан H_J (5.10) не смешивает проекции спина свободного электрона, можно также заменить оператор спина электрона $\widehat{\mathbf{S}}$ скалярным параметром $s = \pm|s|$. С учетом этих упрощений энергия взаимодействия магнитных ионов определяется как

$$\Delta E = E_{\uparrow\uparrow} - E_{\uparrow\downarrow}, \quad (5.14)$$

где $E_{\uparrow\uparrow}, E_{\uparrow\downarrow}$ энергии системы с параллельной и антипараллельной конфигурациями спинов ионов, являющиеся решениями стационарного уравнения Шредингера с одночастичным гамильтонианом:

$$\begin{aligned} H_{\uparrow\uparrow} &= H_0 + JIs [\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_1) + \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_2)], \\ H_{\uparrow\downarrow} &= H_0 + JIs [\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_1) - \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_2)], \end{aligned} \quad (5.15)$$

где $H_0 = -(\hbar^2/2m)\Delta$ – невозмущенный гамильтониан свободного электрона с массой m . Для нахождения разницы энергий параллельной и антипараллельной спиновой конфигураций ионов при наличии ансамбля электронов удобно построить дискретные спектры гамильтонианов (5.15) $H_{\uparrow\uparrow}, H_{\uparrow\downarrow}$ в ящике размера L с нулевыми граничными условиями [142, 60] и вычислить энергии системы при заданном числе частиц N . Разность энергий для параллельной и антипараллельной конфигураций и есть энергия косвенного обмена, она зависит от числа электронов N (или энергии Ферми E_F).

Сначала применим метод непертурбативного вычисления энергии косвенного обмена для стандартной задачи теории РККИ, т.е. обменного взаимодействия двух магнитных центров через двумерный или одномерный электронный газ. Результаты расчета по этой методике сопоставим с результатами теории РККИ. Затем, тот же метод применим к задаче о косвенном обменном взаимодействии магнитных центров через проводящий канал, отделенный от них туннельно-прозрачным

барьером, допускающим в том числе и резонансное туннелирование. В этом случае, в силу резонансной туннельной связи, теория РККИ уже неприменима, но результаты расчета должны с ней согласовываться в предельном случае, когда туннелирование не является резонансным.

5.2 Косвенное обменное взаимодействие магнитных центров через свободные носители

5.2.1 Косвенное обменное взаимодействие в одномерном случае

Рассмотрим задачу о косвенном обменном взаимодействии двух магнитных центров через газ свободных электронов в одномерном случае. В одномерном случае решение стационарного уравнения Шредингера с гамильтонианом (5.15) в ящике длины L с нулевыми граничными условиями является несложной квантовой механической задачей [27]. Важным обстоятельством является наличие в одномерном случае связанных состояний в случае притягивающего дельта-потенциала. Учет этих состояний оказывается принципиально важным при вычислении энергии косвенного обмена. Переходя к пределу непрерывного спектра при устремлении размера ящика $L \rightarrow \infty$ получаем [A11]:

$$\Delta E = \frac{1}{2\pi} \int_0^{E_F} f(E, R) dE + \Delta E_{loc}, \quad (5.16)$$

где

$$\begin{aligned} f &= 2 \arctan \frac{j^2 \sin 2kR}{4k^2 + 2j^2 \sin^2 kR} + \\ &+ \arctan \frac{4kj + j^2 \sin 2kR}{4k^2 - 2j^2 \sin^2 kR} - \arctan \frac{4kj - j^2 \sin 2kR}{4k^2 - 2j^2 \sin^2 kR}, \\ j &= JI |s| \frac{m}{\hbar^2}, \quad k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad R = |\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2| \end{aligned} \quad (5.17)$$

E_F – энергия Ферми невозмущенного электронного газа. ΔE_{loc} – разность энергий локализованных состояний для параллельной и антипараллельной спиновых кон-

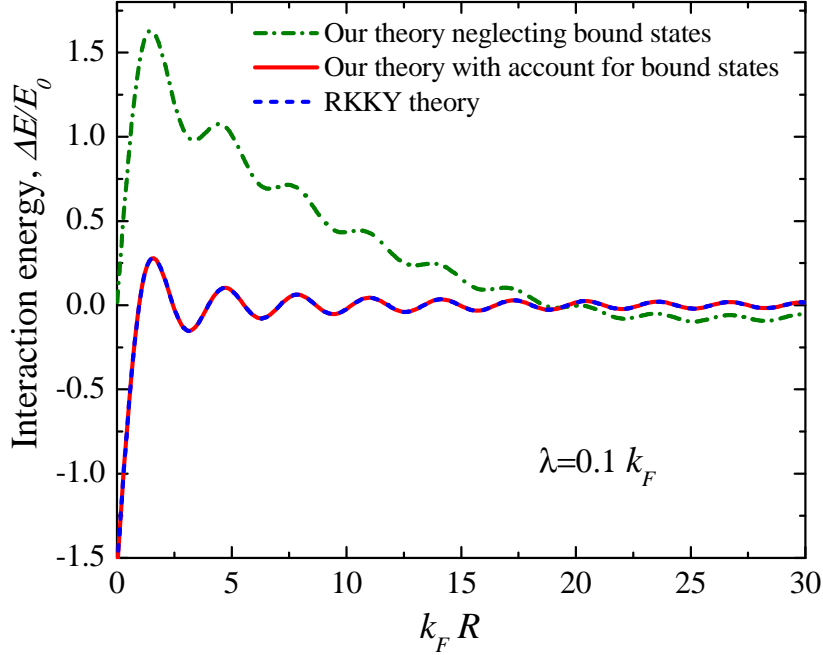


Рис. 5.3: Энергия косвенного обменного взаимодействия в одномерном случае. Точное решение с учётом и без учёта связанных состояний, сравнение с теорией РККИ

фигураций ионов. Энергия локализованных состояний определяется следующим уравнением:

$$\begin{aligned}
 & (\kappa \operatorname{th}(\kappa R/2) + \kappa + 2j) (\kappa \operatorname{coth}(\kappa R/2) + \kappa \pm 2j) \\
 & = - (\kappa \operatorname{th}(\kappa R/2) + \kappa \pm 2j) (\kappa \operatorname{coth}(\kappa R/2) + \kappa + 2j),
 \end{aligned}$$

где $\kappa = \sqrt{2m |E_{loc}|/\hbar}$, $+$, $-$ соответствуют параллельной и антипараллельной конфигурации спинов ионов. Для большого расстояния между ионами $\kappa R \gg 1$:

$$E_{loc}(\kappa R \rightarrow \infty) = -\frac{(JIs)^2 m}{2\hbar^2}.$$

Для антипараллельной конфигурации всегда имеется одно связанное состояние, для параллельной конфигурации связанных состояний нет для двойного отталкивающего дельта-потенциала, или имеется два связанных состояния для двойного притягивающего дельта-потенциала. На Рис. 5.3 приведена зависимость энергии косвенного обмена от расстояния между магнитными ионами, рассчитанная с помощью выражения (5.16) и результат расчета по стандартной теории РККИ для

одномерного случая [135]:

$$E_{RKKY} = E_0 \operatorname{si}(2k_F R),$$

где $E_0 = 4j^2 \hbar^2 / \pi m$, $\operatorname{si}(x)$ – интегральный синус. В расчете обменная константа выбиралась так, что $j/k_F = 0.1$. Для демонстрации роли локализованных состояний на Рис. 5.3 также построен вклад в энергию взаимодействия только от делокализованных состояний, т.е. в пренебрежении ΔE_{loc} . Видно, что при $R < 1/j$ принципиально важно учитывать перекрытие локализованных состояний, вносящее существенный вклад в косвенный обмен. При больших расстояниях между ионами взаимодействие обеспечивается только делокализованными плоскими волнами и точный ответ совпадает с теорией РККИ. Интересно, что если локализованные состояния учитывать, точное решение совпадает с теорией РККИ и это согласие остается очень хорошим вплоть до $j/k_F = 1$, т.е., вообще говоря, за рамками применимости теории возмущений.

5.2.2 Косвенное обменное взаимодействие в двумерном случае

Для решения задачи в двумерном случае более удобно записать (5.15) в импульсном представлении:

$$(k^2 - k_E^2) \Psi(\mathbf{k}) + 2\lambda_1 e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_1} \Psi(\mathbf{R}_1) + 2\lambda_2 e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_2} \Psi(\mathbf{R}_2) = 0, \quad (5.18)$$

где

$$\lambda_{1,2} = JI_{1,2} s \frac{m}{\hbar^2}, \quad k_E = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad (5.19)$$

Уравнение (5.18) даёт $\Psi(\mathbf{k})$ только для $k \neq k_E$. Для нахождения решения при произвольном k применим подход, описанный в §1.4 (см. (1.46)):

$$\Psi(\mathbf{k}) = (2\lambda_1 e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_1} \Psi(\mathbf{R}_1) + 2\lambda_2 e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_2} \Psi(\mathbf{R}_2)) \times \left[P \frac{1}{k_E^2 - k^2} + Z \delta(k_E^2 - k^2) \right], \quad (5.20)$$

где P обозначает главное значение, $\varepsilon \equiv \varepsilon_\lambda$, Z – неизвестная функция k_E , которая будет найдена позже. После обратного преобразования Фурье и интегрирования по полярному углу φ в k -пространстве получим:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{r}) = & \frac{1}{2}\lambda_1 \left[\frac{Z}{\pi} J_0(k_E \rho_1) + Y_0(k_E \rho_1) \right] \Psi(\mathbf{R}_1) \\ & + \frac{1}{2}\lambda_2 \left[\frac{Z}{\pi} J_0(k_E \rho_2) + Y_0(k_E \rho_2) \right] \Psi(\mathbf{R}_2), \end{aligned} \quad (5.21)$$

где J_0, Y_0 – функции Бесселя и Неймана нулевого порядка, $\rho_{1,2} = |\mathbf{r} - \mathbf{R}_{1,2}|$. Подставляя $\mathbf{r} = \mathbf{R}_{1,2}$ получим:

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{R}_1) = & \lambda_1 \Psi(\mathbf{R}_1) (F + ZT) + \lambda_2 (f + Zt) \Psi(\mathbf{R}_2) \\ \Psi(\mathbf{R}_2) = & \lambda_1 \Psi(\mathbf{R}_1) (f + Zt) + \lambda_2 (F + ZT) \Psi(\mathbf{R}_2), \end{aligned} \quad (5.22)$$

где

$$\begin{aligned} F = & \frac{1}{\pi} P \int_0^\infty \frac{1}{k_E^2 - k^2} k dk \quad T = \frac{1}{2\pi} \\ f = & \frac{1}{\pi} P \int_0^\infty \frac{J_0(kR)}{k_E^2 - k^2} k dk \quad t = \frac{1}{2\pi} J_0(k_E R) \\ R = & |\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2|. \end{aligned} \quad (5.23)$$

Величина F логарифмически расходится, демонстрируя так называемое свойство “дефицита размерности” для дельта-потенциала в двумерном случае [147, 148]. Эта сложность устраняется перенормировкой:

$$\frac{1}{\lambda_{1,2}} \rightarrow \frac{1}{\lambda_{1,2}} + F. \quad (5.24)$$

Из (5.22) с (5.24), требуя $\Psi(\mathbf{R}_{1,2}) \neq 0$, получим уравнение для определения Z :

$$(\lambda_1 ZT - 1)(\lambda_2 ZT - 1) = \lambda_1 \lambda_2 (f + Zt)^2. \quad (5.25)$$

Каждый из двух корней $Z_{1,2}$ определяет решения $\Psi_{Z_{1,2}}(\mathbf{r})$, а общее решение является их линейной комбинацией:

$$\Psi(\mathbf{r}) = A\Psi_{Z_1}(\mathbf{r}) + B\Psi_{Z_2}(\mathbf{r}) \quad (5.26)$$

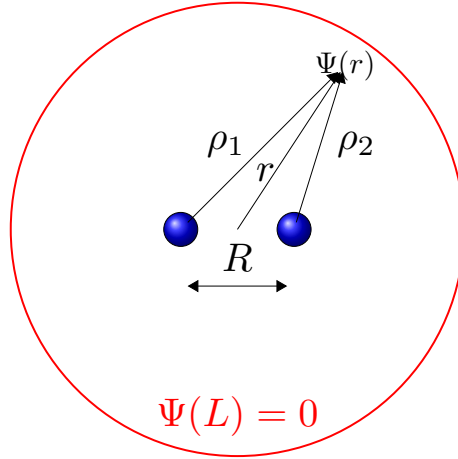


Рис. 5.4: Иллюстрация к методике расчета косвенного обмена в двумерном случае. Двух-центровый рассеивающий потенциал, создаваемый магнитными ионами на расстоянии R находится внутри цилиндрической полости радиуса L .

Поместим систему в большой цилиндрический ящик радиуса L и наложим нулевые граничные условия $\Psi(L, \varphi) = 0$ (Рис.5.4). Используя асимптотику $\Psi(\mathbf{r})$, из (5.21)-(5.26) получим:

$$\Psi(L, \varphi) = \begin{bmatrix} AC_1^+ \cos(k_E L + \delta_1) \\ +BC_2^+ \cos(k_E L + \delta_2) \end{bmatrix} \cos(k_E R \cos \varphi) + \begin{bmatrix} AC_1^- \sin(k_E L + \delta_1) \\ +BC_2^- \sin(k_E L + \delta_2) \end{bmatrix} \sin(k_E R \cos \varphi), \quad (5.27)$$

где

$$\tan \delta_{1,2} = -\frac{\pi}{Z_{1,2}},$$

$$C_{1,2}^\pm = \frac{\lambda_1 \Psi_{Z_{1,2}}(\mathbf{R}_1) \pm \lambda_2 \Psi_{Z_{1,2}}(\mathbf{R}_2)}{2 \sin \delta_{1,2}}. \quad (5.28)$$

Наложение нулевых граничных условий даёт:

$$\begin{cases} k_E = \frac{\pi n}{L} + \frac{\Delta_1}{L} \\ k_E = \frac{\pi n}{L} + \frac{\Delta_2}{L} \end{cases}$$

Здесь $\Delta_{1,2}$ – функции, зависящие от $\lambda_{1,2}, f, T, t$. Полагая нулевую температуру и распределение Ферми для электронов, поправку к полной энергии системы полу-

чаем с помощью методики, описанной в §1.5 (см. (1.66)):

$$\Delta E = \frac{1}{\pi} \int_0^{E_F} [\Delta_1(E) + \Delta_2(E)] dE, \quad (5.29)$$

где E_F - уровень Ферми. Фазовые сдвиги $\Delta_{1,2}$ зависят от $\lambda_{1,2}$, поэтому ΔE различны для разных спиновых конфигураций ионов и спинов электронов. Энергия обмена даётся выражением:

$$E_{ex} = (\Delta E_{\uparrow\uparrow-} + \Delta E_{\uparrow\uparrow+}) - (\Delta E_{\uparrow\downarrow-} + \Delta E_{\uparrow\downarrow+}). \quad (5.30)$$

Здесь стрелки в индексах обозначают проекции спинов ионов, а знаки \pm обозначают проекции спина электрона. Подставляя (5.29) в (5.30), в конечном итоге приходим к ответу [A11]:

$$E_{ex} = \frac{1}{\pi} \int_0^{E_F} \arctan [2\zeta(j) Y_0(k_E R) J_0(k_E R)] dE, \quad (5.31)$$

где $\zeta(j)$ – известная функция:

$$\begin{aligned} \zeta(j) &= j^2 - \frac{j^4}{2} + O(j^6) \\ j &= JI |s| \frac{m}{\hbar^2}. \end{aligned} \quad (5.32)$$

При $j \ll 1$ из (5.31) следует известный результат теории РККИ в двумерном случае [135]:

$$\begin{aligned} E_{RKKY} &= \frac{k_F^2 (JIs)^2}{\pi m \hbar^2} \chi(R), \\ \chi(R) &= J_0(k_F R) Y_0(k_F R) + J_1(k_F R) Y_1(k_F R). \end{aligned} \quad (5.33)$$

Таким образом, точный результат (5.31) переходит в ответ теории РККИ в ведущем порядке по малости возмущения. Подчеркнем, что подход, не основанный на теории возмущений, тем не менее предполагает режим слабой обменной связи, исключая динамику спинов ионов. В случае же сильной обменной связи, т.е. режиме Кондо спин-спиновое взаимодействие ионов подавляется из-за эффективной экранировки каждого магнитного центра облаком спин-поляризованных электронов [144, 145].

5.3 Резонансный косвенный обмен через пространственно отделённый проводящий канал

5.3.1 Резонансный косвенный обмен в двумерном случае

Стандартная постановка задачи о косвенном обмене через свободные носители в двумерном случае проиллюстрирована на Рис.5.5. Двумерный электронный газ локализован в тонком слое, и в той же области пространства находятся магнитные ионы. Задача о резонансном косвенном обмене, возникает при рассмотрении другой ситуации, изображенной на Рис.5.6. В этом случае двумерный электронный газ пространственно отделен от магнитных ионов потенциальным барьером, допускающим слабое туннелирование, характеризуемое энергетическим параметром T . Рассмотрим задачу о косвенном обменном взаимодействии через про-

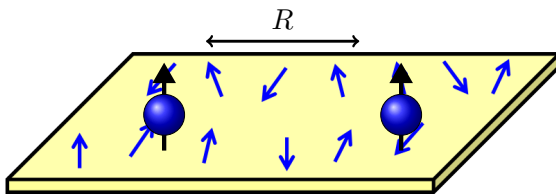


Рис. 5.5: Постановка задачи о РККИ-взаимодействии. Магнитные ионы находятся в электронном газе.

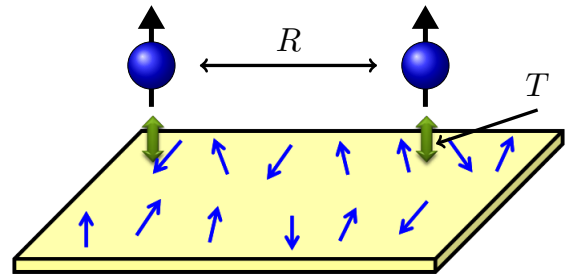


Рис. 5.6: Косвенное обменное взаимодействие через пространственно отделенный проводящий канал.

странственно отделенный двумерный проводящий канал более подробно. Оператор спин-спинового взаимодействия в (5.10) содержит дельта-функцию, поэтому его среднее значение пропорционально квадрату модуля волновой функции электрона на магнитном ионе. Таким образом, если магнитные ионы отделены от электронного газа туннельным барьером, то для волновой функции электрона, затухающей вглубь туннельного барьера следует ожидать подавления косвенного обменного взаимодействия в меру коэффициента $\exp(-4\kappa d)$, где $\kappa = \sqrt{2mU_0}/\hbar$, U_0 и d – высота и ширина барьера, соответственно. Однако, если кулоновский потенциал

иона образует связанное состояние с энергией в диапазоне энергий заполненных состояний электронного газа, возможно резонансное туннелирование. В этом случае одночастичная волновая функция имеет значительную амплитуду в области магнитных ионов. Рассмотрим два магнитных иона, расположенных на одинаковом расстоянии d от квантовой ямы. Расстояние между ионами R велико, так что перекрытие волновых функций электронов, локализованных на ионах, отсутствует, и прямой обмен исключен. Пусть имеются связанные состояния на ионах, создающие условия для резонансного туннелирования. Тогда, возникает эффективная гибридизация волновых функций двумерных электронов с волновыми функциями связанных состояний (см. §1.4). Рассмотрим гамильтониан:

$$H = H_0 + H_T + H_J, \quad (5.34)$$

где H_0 – гамильтониан системы без туннельной связи и спин-спинового взаимодействия, H_T – туннельный член, H_J – обменная часть (5.10). В представлении вторичного квантования:

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \varepsilon_0 \hat{f}_1^+ \hat{f}_1 + \varepsilon_0 \hat{f}_2^+ \hat{f}_2 + \sum_n \varepsilon_n \hat{c}_n^+ \hat{c}_n, \\ \hat{H}_T &= \sum_n \left(t_{1n} \hat{f}_1^+ \hat{c}_n + t_{2n} \hat{f}_2^+ \hat{c}_n + h.c. \right), \\ \hat{H}_J &= JA \left(I_1 s \hat{f}_1^+ \hat{f}_1 + I_2 s \hat{f}_2^+ \hat{f}_2 \right), \end{aligned} \quad (5.35)$$

где $f_{1,2}^+, f_{1,2}$ – операторы рождения и уничтожения для связанных состояний на магнитных ионах 1, 2, имеющих одинаковую энергию ε_0 и локализованные волновые функции ψ_1, ψ_2 . I_1, I_2 – спины магнитных ионов, s – проекция спина электрона, c_n^+, c_n – операторы рождения и уничтожения для делокализованных состояний в проводящем канале, характеризуемых квантовыми числами n , энергией ε_n и волновыми функциями φ_n , J – обменная константа, A – квадрат модуля амплитуды волновой функции связанного состояния электрона на магнитном ионе:

$$A = |\psi_1(\mathbf{R}_1)|^2 = |\psi_2(\mathbf{R}_2)|^2. \quad (5.36)$$

Энергия отсчитывается от уровня размерного квантования в квантовой яме. Туннельный матричный элемент (туннельный параметр) дается следующим выражением (1.19):

$$t_{(1,2),n} = -\frac{\hbar^2}{2m_{\perp}} \int_{\Omega_S} dS \left(\varphi_n \frac{d}{dz} \psi_{1,2}^* - \psi_{1,2}^* \frac{d}{dz} \varphi_n \right), \quad (5.37)$$

где интегрирование ведется по плоскости произвольного сечения туннельной барьера Ω_S . Примем направление, перпендикулярное плоскости квантовой ямы за ось z , причем $z = 0$ соответствует краю квантовой ямы, ось x проходит через центры ионов, так что координаты центров магнитных ионов:

$$\mathbf{R}_1 = (-R/2, 0, d); \quad \mathbf{R}_2 = (R/2, 0, d).$$

Поскольку локализованные волновые функции ψ_1, ψ_2 не перекрываются, их конкретный вид не имеет существенного значения, удобно положить их в виде:

$$\psi_{1,2} = \left(\frac{2}{\pi r_0^2} \right)^{3/4} e^{-\left(\frac{x \pm R/2}{r_0}\right)^2} e^{-\left(\frac{y}{r_0}\right)^2} e^{-\left(\frac{z-d}{r_0}\right)^2}, \quad (5.38)$$

где r_0 – радиус локализации, волновые функции двумерных электронов возьмем в следующем виде:

$$\varphi_{\mathbf{k}} = \eta(z) e^{i\mathbf{k}\rho}. \quad (5.39)$$

Здесь \mathbf{k} – волновой вектор в плоскости квантовой ямы, ρ – двумерный радиус-вектор в плоскости, $\eta(z)$ – огибающая волновой функции в направлении z , отвечающая первому уровню размерного квантования в квантовой яме. Снаружи от квантовой ямы:

$$\eta(z) = \zeta a^{-1/2} e^{-qz}, \quad (5.40)$$

где $q = \sqrt{2m_{\perp}U_0}/\hbar^2$, U_0 – энергия связи локализованного состояния, определяющая также и высоту потенциального барьера между магнитными ионами и квантовой ямой [A8], a – толщина квантовой ямы, ζ – безразмерный параметр, слабо зависящий от q и a . Для реалистичной прямоугольной ямы $\zeta \approx 0.5$. Вычисление (5.37) с использованием (5.38) (в предположении $r_0 \ll k^{-1}$) и (5.39) дает:

$$t_{1,2}(k) = \sqrt{\frac{\hbar^2 T}{2\pi m}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_{1,2}}, \quad (5.41)$$

где T – энергетический параметр, характеризующий туннелирование:

$$T = (2\pi)^{3/2} \zeta^2 \frac{r_0 m}{am_\perp} U_0 e^{-2qd}, \quad (5.42)$$

m – эффективная масса в плоскости квантовой ямы.

Представим гибридованные собственные функции Ψ всей системы в виде разложения по локализованным состояниям на ионах и делокализованным состояниям электронного газа в виде (см §1.4):

$$\Psi = \nu_1 \psi_1 + \nu_2 \psi_2 + \Phi, \quad \Phi = \int \nu_{\mathbf{k}} \varphi_{\mathbf{k}} d\mathbf{k} \quad (5.43)$$

Подставляя (5.43) в стационарное уравнение Шредингера $H\Psi = E\Psi$ с гамильтонианом (5.34) аналогично (1.45) получаем:

$$\begin{aligned} \nu_1 (\varepsilon_0 - E + \lambda_1) + \int t_{1\mathbf{k}} \nu_{\mathbf{k}} d\mathbf{k} &= 0 \\ \nu_2 (\varepsilon_0 - E + \lambda_2) + \int t_{2\mathbf{k}} \nu_{\mathbf{k}} d\mathbf{k} &= 0 \\ \nu_{\mathbf{k}} (\varepsilon - E) + \nu_1 t_{1\mathbf{k}}^* + \nu_2 t_{2\mathbf{k}}^* &= 0, \end{aligned} \quad (5.44)$$

где

$$\lambda_{1,2} = JAI_{1,2} s, \quad \varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

$\nu_{\mathbf{k}}$ выражено из последнего уравнения (5.44) следующим образом:

$$\nu_{\mathbf{k}} = P \frac{\nu_1 t_{1\mathbf{k}}^* + \nu_2 t_{2\mathbf{k}}^*}{E - \varepsilon} + Z (\nu_1 t_{1\mathbf{k}}^* + \nu_2 t_{2\mathbf{k}}^*) \delta(E - \varepsilon), \quad (5.45)$$

где P обозначает главное значение, а $Z(E)$ должно быть найдено позднее. Подстановка (5.45) в (5.44) даёт:

$$\begin{aligned} \nu_1 (\lambda_1 + F_{11} + ZT_{11} - E') + \nu_2 (F_{21} + ZT_{21}) &= 0 \\ \nu_1 (F_{12} + ZT_{12}) + \nu_2 (\lambda_2 + F_{22} + ZT_{22} - E') &= 0, \end{aligned} \quad (5.46)$$

где

$$\begin{aligned} F_{\alpha\beta} &= P \int \frac{t_{\alpha\mathbf{k}}^* t_{\beta\mathbf{k}}}{E - \varepsilon} d\mathbf{k}, \quad T_{\alpha\beta} = \int t_{\alpha\mathbf{k}}^* t_{\beta\mathbf{k}} \delta(\varepsilon - E) d\mathbf{k}, \\ E' &= E - \varepsilon_0, \quad \alpha, \beta = 1, 2. \end{aligned} \quad (5.47)$$

Поставляя (5.41) в (5.47) получаем:

$$\begin{aligned} T_{11} = T_{12} = T, \quad T_{12} = T_{21} \equiv t = T J_0(k_E R), \\ F_{11} = F_{22} \equiv F, \quad F_{12} = F_{21} \equiv f = \pi T Y_0(k_E R), \end{aligned} \quad (5.48)$$

где $k_E = \sqrt{2mE}/\hbar$. F представляет собой сдвиг положения резонанса относительно ε_0 и играет ту же роль, что и в (5.23). Эта величина может быть вычислена явно, но для этого выражение (5.41) должно быть скорректировано для области $k \sim r_0^{-1}$, в противном случае при вычислении F возникнет расходимость на больших k . Фактически, эта процедура аналогично перенормировке (5.24) для дельта-потенциала. Конечное F содержит дополнительную степень малого туннельного параметра T , не зависит от R и, поэтому, его можно не учитывать в ведущем порядке по T . Из (5.46) следует выражение для Z :

$$(ZT - E' + \lambda_1)(ZT - E' + \lambda_2) = (f + Zt)^2. \quad (5.49)$$

С учетом (5.43) и (5.45) делокализованная часть гибридной волновой функции дается выражением:

$$\Phi(E) = \pi \sqrt{\frac{2\pi m T}{\hbar^2}} \begin{bmatrix} \nu_1 \left(\frac{Z}{\pi} J_0(k\rho_1) + Y_0(k\rho_1) \right) \\ + \nu_2 \left(\frac{Z}{\pi} J_0(k\rho_2) + Y_0(k\rho_2) \right) \end{bmatrix} \quad (5.50)$$

Дальнейшие вычисления аналогичны (5.26)-(5.31), однако в данном случае будем сохранять только главный порядок по туннельному параметру, это второй порядок T^2 . Таким образом, приходим к конечному выражению для энергии косвенного обмена в случае туннельной связи с проводящим каналом [A10]:

$$E_{ex} = \frac{1}{\pi} \int_0^{E_F} \arctan \left[\frac{8\pi^2 T^2 j^2 J_0(kR) Y_0(kR)}{((\varepsilon - \varepsilon_0)^2 - j^2)^2} \right] d\varepsilon, \quad (5.51)$$

где $j = |J A I s|$. Выражение (5.51) напоминает (5.31), но в данном случае аргумент арктангенса в (5.51) имеет полюса при $\varepsilon = \varepsilon_0 \pm j$ и результат кардинальным образом зависит от того, лежат ли эти резонансы в области интегрирования $\varepsilon \in [0, E_F]$. Если да, то энергию обмена можно оценить из ширины резонансов:

$$E_{res} \sim \sqrt{Tj}, \quad (5.52)$$

при этом период осцилляций от расстояния между ионами $\hbar/\sqrt{2m\varepsilon_0}$.

Предельный нерезонансный случай возникает при $\varepsilon_0 \gg E_F$, $j \ll E_F$. Тогда интегрирование (5.51) даёт:

$$E_{nr} = \frac{8\pi T^2 j^2 E_F}{\varepsilon_0^4} \chi(R), \quad (5.53)$$

$$\chi(R) = J_0(k_F R) Y_0(k_F R) + J_1(k_F R) Y_1(k_F R).$$

В нерезонансном случае применима теория возмущений, поэтому выражение (5.53) практически совпадает с результатом стандартной теории РКИИ. Функциональная зависимость от R та же самая, что и для двумерного РККИ взаимодействия без туннелирования (5.12) [135], отличие префактора от стандартной формулы возникает из-за конкретного способа описания туннелирования и связанного состояния.

Важным обстоятельством является то, что амплитуда косвенного обменного взаимодействия для резонансного случая оказывается намного выше, чем для нерезонансного. Полагая в обоих случаях $\varepsilon_0 \sim E_F$, можно оценить усиление взаимодействия за счет резонансного туннелирования:

$$\gamma \equiv \frac{E_{res}}{E_{nr}} \sim \frac{\varepsilon_0^4}{8\pi T^{3/2} j^{3/2} E_F}. \quad (5.54)$$

Для численной оценки возьмем параметры InGaAs-гетероструктур, исследованных в работах [106, 114, 149] и рассматриваемых более подробно в §5.4. Для $T \sim 0.01E_F$, $j \sim 0.1E_F$ усиление γ оказывается около трёх порядков. На Рис.5.7 показаны результаты численного расчета по формуле (5.51) для различных положений уровней энергии связанных состояний на ионах ε_0 относительно энергии Ферми электронного газа E_F . Область применимости расчета $R > r_0$ (для реальных структур $r_0 \sim 1$ нм). В расчете полагалось $m = 0.1m_0$ (m_0 – масса свободного электрона), $E_F = 10$ мэВ, $j = 0.1E_F$. Верхний график (Рис.5.7а) соответствует резонансному случаю. Для всех кривых резонансы лежат в области интегрирования. В случае $\varepsilon_0 = E_F$ один из двух полюсов аргумента арктангенса лежит вне

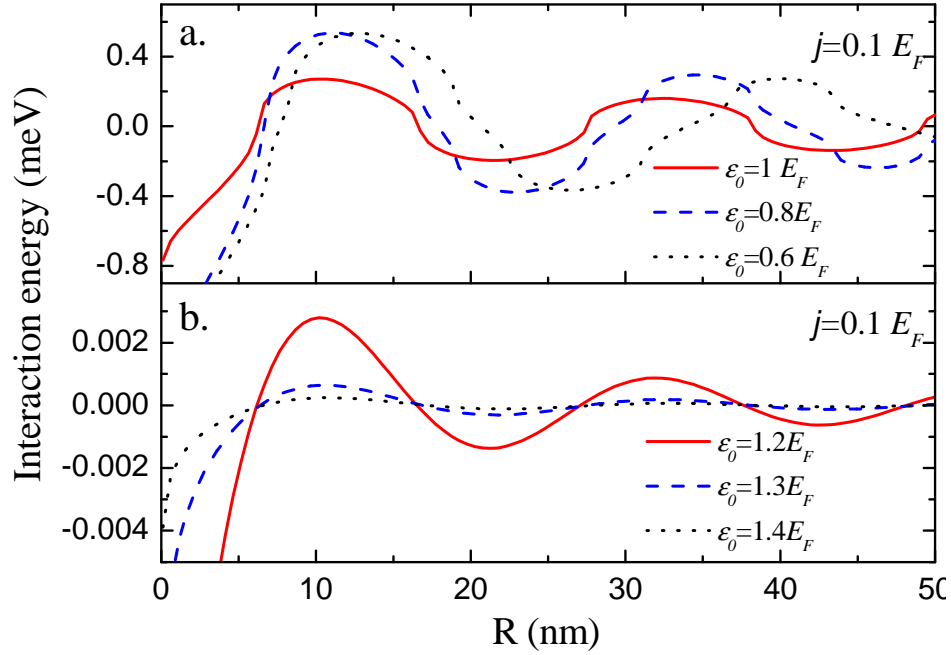


Рис. 5.7: Энергия косвенного обменного взаимодействия в зависимости от расстояния между магнитными ионами в резонансном (а) и нерезонансном (б) случаях

области интегрирования и это приводит к некоторому уменьшению энергии обмена. Расчет для нерезонансного случая приведен на Рис.5.7б, в этом случае аргумент арктангенса в выражении (5.51) не имеет полюсов в области интегрирования и амплитуда осцилляций энергии косвенного обмена падает практически на два порядка. Рис. 5.8 демонстрирует зависимость энергии косвенного обмена от обменного параметра j . В нерезонансном случае эта зависимость отвечает второму порядку теории возмущений $E_{ex} \sim j^2$, однако в резонансном случае энергия взаимодействия может даже уменьшаться с увеличением j , когда один из резонансов выходит из диапазона $[0, E_F]$. Именно такая ситуация возникает для $j = 0.3E_F$ на Рис.5.8а. Формула (5.51) имеет и другой нерезонансный предельный случай для $j \gg E_F, j \gg \varepsilon_0$:

$$E_{nrj} = \frac{8\pi T^2 E_F}{j^2} \chi(R). \quad (5.55)$$

Согласно выражению (5.55) в этой ситуации косвенный обмен подавляется, что качественно согласуется с режимом Кондо для сильной обменной связи. Заметим,

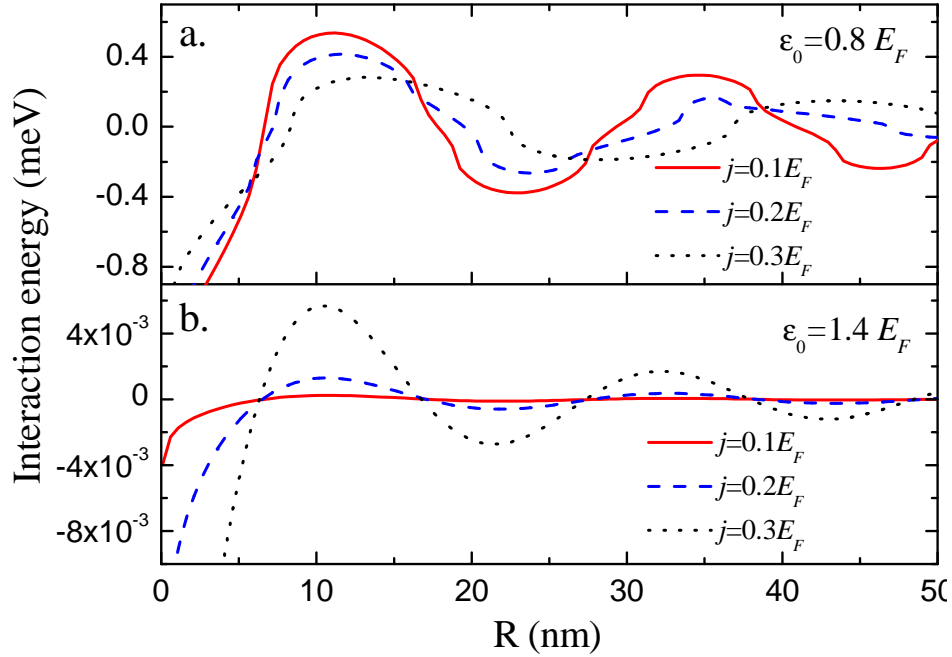


Рис. 5.8: Энергия косвенного обменного взаимодействия в зависимости от расстояния между магнитными ионами для различных значений обменного параметра j в резонансном (a) и нерезонансном (b) случае.

правда, что в случае $j \gg E_F, j \gg \epsilon_0$ применение формулы (5.51), вообще, говоря, некорректно, поскольку при $j \gg E_F$ спиновая динамика ионов (не учитываемая в представленной теории) может играть важную роль. В то же время, благодаря малому туннельному параметру T , возможен случай, когда обменная константа порядка E_F , но спиновая динамика ионов не играет существенной роли.

5.3.2 Резонансный косвенный обмен в одномерном случае

Случай одномерного проводящего канала во многом аналогичен двумерному. При его анализе будет использован несколько модифицированный способ вычисления обменной энергии, основанный на прямой диагонализации гамильтониана системы дискретных уровней. Как будет показано в следующей главе, этот метод удобен для расчета косвенного обмена в более сложных системах на основе графена. Кроме того в этом рассмотрении приведем обобщение на случай различных энергий связанных состояний взаимодействующих магнитных ионов. Рассмотрим два маг-

нитных иона, расположенных вблизи полупроводниковой квантовой проволоки, т.е. одномерного канала, заполненного электронами с квадратичным законом дисперсии $E = \hbar^2 k^2 / 2m$, где m - эффективная масса в направлении вдоль канала. Будем полагать, что каждый магнитный ион имеет связанное состояние для электрона, сформированное притягивающим потенциалом. Расстояние между ионами велико, так что прямое обменное взаимодействие исключено, но оба иона расположены вблизи канала и туннельно связаны с ним. Туннельный гамильтониан системы представлен выражениями (5.34) (5.35). Координаты магнитных ионов положим $\mathbf{R}_1 = (-R/2, 0, d)$, $\mathbf{R}_2 = (R/2, 0, d)$., Ось z перпендикулярна каналу, $z = 0$ соответствует его центру, ось x направлена вдоль канала и проходит через центры магнитных ионов. Волновые функции связанных состояний ψ_1, ψ_2 , аналогично (5.38) положим :

$$\psi_{1,2} = (2/\pi r_0^2)^{3/4} e^{-\left(\frac{x \pm R/2}{r_0}\right)^2} e^{-\left(\frac{y}{r_0}\right)^2} e^{-\left(\frac{z-d}{r_0}\right)^2}, \quad (5.56)$$

где r_0 - радиус локализации. Делокализованные волновые функции состояний в канале нормированы на длину $2L$:

$$\varphi_k = \eta(y, z) \frac{e^{ikx}}{\sqrt{2L}}, \quad \varphi_{-k} = \eta(y, z) \frac{e^{-ikx}}{\sqrt{2L}}, \quad (5.57)$$

где η is - огибающая основного уровня размерного квантования. Вне проводящего канала

$$\eta(y, z) = \zeta \sqrt{\frac{2}{\pi}} q e^{-q\rho}, \quad (5.58)$$

где $\rho = \sqrt{y^2 + z^2}$, $q = \sqrt{2m_{\perp} U_0} / \hbar$, U_0 - энергия связи локализованного состояния, определяющая высоту туннельного барьера, величина ζ слабо зависит от q и радиуса канала, для узкого канала $\zeta \approx 1$. Из (5.56) и (5.57) для туннельного параметра получаем:

$$t_{(1,2),k} = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{3/4} \sqrt{r_0} \frac{\hbar^2 q^2}{2m_{\perp}} e^{-qd} \frac{e^{\pm ikR/2}}{\sqrt{2L}}. \quad (5.59)$$

Дальнейшее решение задачи сводится к диагонализации гамильтониана (5.34). Кроме способа решения, использованного в §5.3.1, в одномерном случае возможно

провести такую диагонализацию непосредственно аналитически для набора дискретных уровней, характеризуемых волновыми числами k_n . Поместим систему в “ящик” длины $2L$. Без учета взаимодействия допустимые значения волновых векторов при нулевых граничных условиях на границе образуют дискретный набор $k \in \{k_1, k_2, \dots, k_\infty\}$, где $k_n = k_{0,n} = \pi n/L$. Представление гамильтониана \hat{H} (5.34) в базисе $(\psi_1, \psi_2, \{\varphi_k\}, \{\varphi_{-k}\})$ имеет следующий явный вид:

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_0 + \lambda_1 & 0 & t_{1,k_1} & \cdots & t_{1,k_\infty} & t_{1,-k_1} & \cdots & t_{1,-k_\infty} \\ 0 & \varepsilon_0 + \lambda_2 & t_{2,k_1} & \cdots & t_{2,k_\infty} & t_{2,-k_1} & \cdots & t_{2,-k_\infty} \\ t_{1,k_1}^* & t_{2,k_1}^* & \varepsilon_{k_1} & \cdots & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ t_{1,k_\infty}^* & t_{2,k_\infty}^* & 0 & \cdots & \varepsilon_{k_\infty} & 0 & \cdots & 0 \\ t_{1,-k_1}^* & t_{2,-k_1}^* & 0 & \cdots & 0 & \varepsilon_{k_1} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ t_{1,-k_\infty}^* & t_{2,-k_\infty}^* & 0 & \cdots & 0 & 0 & \cdots & \varepsilon_{k_\infty} \end{pmatrix}, \quad (5.60)$$

где $\lambda_{1,2} = JAI_{1,2}s$, энергия дискретного уровня $\varepsilon_n = \hbar^2 k_n^2 / 2m$. Матрицу (5.60) можно диагонализировать аналитически, при этом новые волновые числа (соответствующие собственным значениям ε_n как $k_n = \sqrt{2m\varepsilon_n}/\hbar$) даются выражением:

$$k_{(1,2)n} = k_{0,n} + \frac{1}{L} \Delta_{(1,2)n}, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (5.61)$$

где $\Delta_{(1,2)n}$ - два корня следующего характеристического уравнения:

$$\begin{aligned} & (\varepsilon_0 + \lambda_1 - \varepsilon_n + T_n/2 \cot \Delta) (\varepsilon_0 + \lambda_2 - \varepsilon_n + T_n \cot \Delta) = \\ & = T_n^2 / 4 (\cot \Delta \cos(k_n R) + \sin(k_n R))^2, \end{aligned} \quad (5.62)$$

где T_n - туннельный параметр:

$$T_n = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{3/2} \frac{r_0 m q^2}{m_\perp k_n} U_0 e^{-2qd}. \quad (5.63)$$

Величина $\Delta_{(1,2)n}$ имеет ясный физический смысл фазы рассеяния свободного носителя на магнитных центрах и зависит от конфигураций их спинов и спина электрона. Два набора волновых чисел $\{k_{1,n}\}, \{k_{2,n}\}$ при наличии двух магнитных центров заменяют собой два набора, характеризующих состояния в “пустом” ящике

$\{k_{0,n}\}, \{-k_{0,n}\}$. Полная энергия системы дается выражением:

$$\begin{aligned} E_\alpha &= \sum_{n,s} \frac{\hbar^2}{2m} (k_{1,n}^2 + k_{2,n}^2) \\ &= E_0 + \frac{\hbar^2}{m} \sum_n \frac{k_{0,n}}{L} [\Delta_{1,n}(\alpha, s) + \Delta_{2,n}(\alpha, s)] + O\left(\frac{1}{L}\right), \end{aligned} \quad (5.64)$$

где E_0 обозначает энергию системы электронов в отсутствие связи с магнитными центрами. Переходя к термодинамическому пределу $L \rightarrow \infty$ для разности энергий параллельной и антипараллельных конфигураций спинов ионов получим:

$$E_{ex} = \frac{\hbar^2}{\pi m} \sum_{i=1,2,s=\pm 1/2} \int_0^{E_F} dk k [\Delta_{i,k}(\uparrow\uparrow, s) - \Delta_{i,k}(\uparrow\downarrow, s)], \quad (5.65)$$

что в ведущем порядке по туннелированию T^2 приводит к выражению:

$$E_{ex} = \frac{1}{\pi} \int_0^{E_F} d\varepsilon \arctan \left[\frac{j^2 T(k)^2 \sin(2kR)}{((\varepsilon_0 - \varepsilon)^2 - j^2)^2} \right], \quad (5.66)$$

где $j = JA|I||s|$. Как и в двумерном случае, результат интегрирования (5.66) зависит от того, лежат ли полюса аргумента арктангенса в пределах интегрирования, т.е. реализуется ли резонансный случай $\varepsilon_0 \in [0, E_F]$. В резонансном случае энергию обмена можно оценить как $E_{res} \sim \sqrt{jT(k_0)}$, $k_0 = \sqrt{2m\varepsilon_0}/\hbar$. В нерезонансном случае в силу малости туннельного и обменного параметров арктангенс следует заменить аргументом, что приводит к результату теории РККИ: $E_{nr} \sim E_F j^2 T(k_F)^2 / \varepsilon_0^4$. Для оценки усиления косвенного обмена за счет резонансного туннелирования положим $T(k_0) \approx T(k_F) \equiv T$:

$$\frac{E_{res}}{E_{nr}} \sim \left(\frac{\varepsilon_0}{\sqrt{jT}} \right)^3. \quad (5.67)$$

На Рис. 5.9 приведены результаты расчета энергии косвенного обмена согласно (5.66) для резонансного и нерезонансного случаев, соответственно. Параметры расчета представляют собой оценки для проводящего канала на основе InGaAs и отделенного от него слоя магнитных ионов Mn в состоянии примеси замещения Mn_{Ga} . Высота барьера в этом случае $U_0 \sim 100$ мэВ, а косвенный обмен обеспечивается дырками. Оставшиеся параметры расчета: $r_0 \sim 1$ нм, $m \sim m_\perp = 0.1m_0$,

$E_F = 10$ мэВ, расстояние между квантовой проволокой и слоем магнитных ионов $d = 5$ нм, $j \sim 1$ мэВ. При этих параметрах $T \sim 0.01E_F$, $j \sim 0.1E_F$. Как видно из Рис. 5.9, в резонансном случае возникает усиление косвенного обмена почти на 3 порядка. Кроме того, в резонансном случае период осцилляций от расстояния между ионами связан с волновым числом, соответствующем локализованному состоянию $k_0 = \sqrt{2m\varepsilon_0}/\hbar$, а в нерезонансном случае - уровню Ферми.

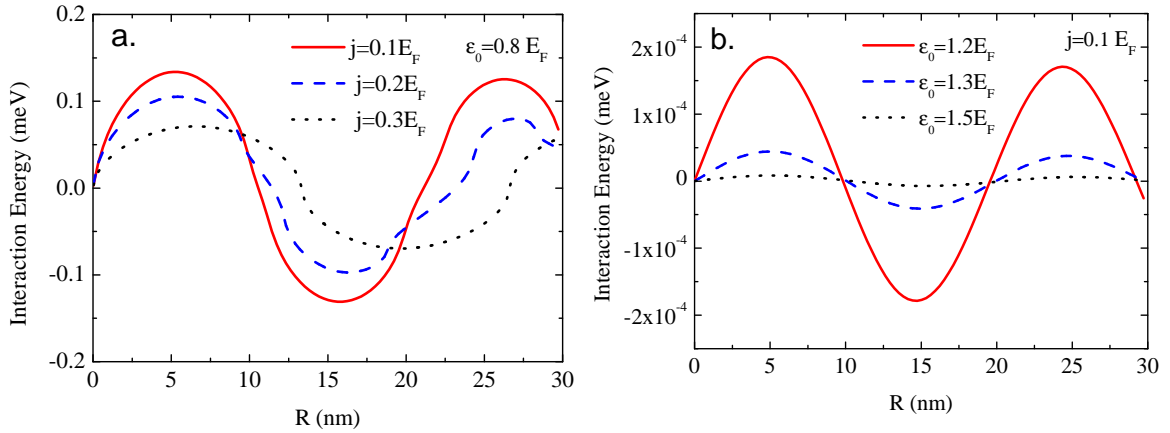


Рис. 5.9: Энергия косвенного обменного взаимодействия в зависимости от расстояния между магнитными центрами в резонансном (а) и нерезонасном (б) случае.

Как и при рассмотрении стандартной задачи о косвенном обмене в §5.2.1, спецификой одномерного случая является существенная роль локализованных состояний в обменном дельта-потенциале. В данном случае форма кривых на Рис. 5.9b в области малых расстояний отличается от результата теории РККИ. Это связано с тем, что в приведенных вычислениях мы пренебрегли связанными состояниями электронов, которые возникают в одномерном гамильтониане (5.34) уже после учёта гибридизации. Их аккуратный учёт позволяет восстановить согласие с теорией РККИ. Однако, в резонансном случае, эти состояния не играют роли, поскольку энергия косвенного обмена в основном формируется только состояниями в канале вблизи резонансной энергии, в то время как в нерезонансном случае - всем спектром свободных носителей [A11].

Выражение (5.66) можно обобщить на случай различных энергий связанных

состояний двух ионов $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ и, соответственно различных туннельных параметров T_1, T_2 :

$$E_{ex} = \frac{1}{\pi} \int_0^{E_F} d\varepsilon \arctan \left[\frac{j^2 T_1 T_2 \sin(2kR)}{((\varepsilon_1 - \varepsilon)^2 - j^2) ((\varepsilon_2 - \varepsilon)^2 - j^2)} \right]. \quad (5.68)$$

В этом случае энергия косвенного обмена подавляется в меру фактора $\beta < 1$:

$$\begin{aligned} E_{res} &\sim \sqrt{j\tilde{T}}, & \text{if } \beta > 1 \\ E_{res} &\sim \beta \sqrt{j\tilde{T}}, & \text{if } \beta < 1 \\ \beta &= \frac{\sqrt{j\tilde{T}}}{|\varepsilon_2 - \varepsilon_1|}, \quad \tilde{T} = \sqrt{T_1 T_2} \end{aligned} \quad (5.69)$$

5.4 Резонансный косвенный обмен в гетероструктурах на основе InGaAs с дельта-слоем Mn

В данном параграфе теория резонансного косвенного обмена применена для анализа экспериментов по исследованию ферромагнитных свойств гетероструктуры $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, содержащей квантовую яму и пространственно отделённый от нее слой магнитной примеси (Mn). Основным состоянием примеси Mn в InGaAs является конфигурация примеси замещения, в этом случае Mn является акцептором с энергией активации около 100 мэВ и обеспечивает легирование р-типа (см. Главу 3). В таких системах квантовая яма заполнена дырками, формирующих проводящий канал. Концентрация ионов марганца в рассматриваемой системе мала, так что прямого перекрытия волновых функций соседних ионов нет. Однако, из-за близости слоя марганца к квантовой яме возможно туннелирование дырок между квантовой ямой и связанными состояниями на Mn и косвенное обменное взаимодействие между ионами Mn через дырки в квантовой яме. Эксперименты показывают, что гетероструктуры на основе InGaAs, содержащие тонкий слой Mn, расположенный вблизи квантовой ямы $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ демонстрируют ферромагнитные свойства (см. 5.1.3). При этом существенную роль в ферромагнетизме играет квантовая яма. В частности, температура Кюри, соответствующая ферромагнитному фазовому переходу немонотонно зависят от глубины квантовой ямы [140].

При рассмотрении ферромагнетизма в двумерных и квазидвумерных структурах необходимо сделать замечание относительно температуры Кюри. В идеальной двумерной системе с обменным взаимодействием Гейзенберга вообще говоря, спонтанное нарушение непрерывной симметрии c_∞ запрещено теоремой Мермина-Вагнера [150, 128]. В теории резонансного косвенного обмена, изложенной в §5.3, фактически изучается эффективная обменная константа, т.е. энергия косвенного обменного взаимодействия между двумя соседними магнитными ионами. В трехмерном случае эта энергия непосредственно связана с температурой Кюри, определяемой как критическая температура фазового перехода в ферромагнитное состояние. В двумерном случае, в реальной полупроводниковой системе GaAs+Mn температуру Кюри T_C можно определить как температуру, при которой возникает локальный ферромагнитный порядок, при котором магнитная корреляционная длина превышает среднее расстояние между ионами Mn [A13]. В эксперименте определённая таким образом T_C извлекается из температурной зависимости электрического сопротивления в плоскости квантовой ямы. При возникновении локального ферромагнитного порядка на этой зависимости возникает характерный максимум [151, 152], детальные соображения относительно критической температуры в такой системе и способа её определения в эксперименте по транспорту приведены в работах [149, 153]. Задача о косвенном обмене между двумя ионами Mn i и j через двумерный канал дырок схематически проиллюстрирована на Рис. 5.10. Здесь $I_{i,j}$ – проекция спина i -ого (j -ого) магнитного иона, $\varepsilon_{i,j}$ – энергии связанных состояний дырки на магнитных ионах, $d_{i,j}$ – расстояние между ионами и квантовой ямой.

Расчет косвенного обмена произведем с помощью развитой выше теории (§5.3), при этом учтем распределения энергий связанных состояний на магнитных ионах в некотором диапазоне из-за присутствующих в реальных образцах электростатических флуктуаций. Аналогично (5.34), (5.35), гамильтониан системы двух маг-

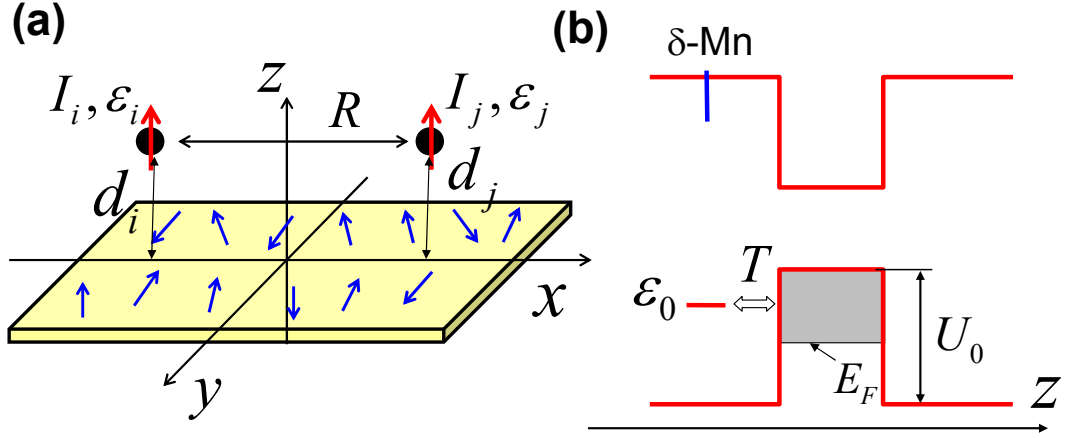


Рис. 5.10: Иллюстрация косвенного обмена между ионами Mn через двумерный канал дырок (a) и зонная диаграмма гетероструктуры на основе InGaAs с квантовой ямой и слоем Mn(b).

нитных ионов i, j , туннельно связанных с дырочным газом запишем в виде:

$$H = H_0 + H_T + H_J,$$

$$\hat{H}_0 = \epsilon_i \hat{f}_i^+ \hat{f}_i + \epsilon_j \hat{f}_j^+ \hat{f}_j + \int \epsilon \hat{c}_{\mathbf{k}}^+ \hat{c}_{\mathbf{k}} d\mathbf{k}, \quad (5.70)$$

$$\hat{H}_T = \int \left(t_{i\mathbf{k}} \hat{f}_i^+ \hat{c}_{\mathbf{k}} + t_{j\mathbf{k}} \hat{f}_j^+ \hat{c}_{\mathbf{k}} + h.c. \right) d\mathbf{k}, \quad (5.71)$$

$$\hat{H}_J = JA \left(I_i s \hat{f}_i^+ \hat{f}_i + I_j s \hat{f}_j^+ \hat{f}_j \right), \quad (5.72)$$

где H_0 – гамильтониан системы без туннельной связи и в отсутствие обменного взаимодействия, H_T описывает туннелирование, H_J – обменный член, f_i^+, f_i – операторы рождения и уничтожения для локализованного состояния на ионе i , характеризующегося энергией ϵ_i и волновой функцией ψ_i , $c_{\mathbf{k}}^+, c_{\mathbf{k}}$ – операторы рождения и уничтожения для состояния двумерной тяжелой дырки с волновым вектором в плоскости \mathbf{k} , энергией ϵ и волновой функцией $\varphi_{\mathbf{k}}$, J – обменная константа, A – квадрат модуля волновой функции дырки на магнитном ионе, s – проекция спина дырки, Туннельный матричный элемент $t_{i,\mathbf{k}}$ равен (5.41):

$$t_i(k) = \sqrt{\frac{\hbar^2 T_i}{2\pi m}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i}, \quad (5.73)$$

где m – эффективная масса дырки в плоскости квантовой ямы, T_i – энергетический

параметр туннелирования:

$$T_i = \alpha U_0 e^{-2qd_i}, \quad (5.74)$$

где U_0 – высота потенциального барьера, отделяющего магнитные ионы от дырок в КЯ, $q = \sqrt{2m_\perp U_0}/\hbar$, m_\perp – эффективная масса вдоль направления туннелирования, т.е. перпендикулярно плоскости ямы, безразмерный параметр α включает в себя малозначимые особенности волновой функции делокализованной дырки и волновой функции связанного состояния [A10]. Обобщение формулы (5.51) на случай различных энергий связанных состояний и различных туннельных параметров для двух ионов аналогично одномерной формуле (5.68) выглядит следующим образом [A13]:

$$E_{ij} = \frac{1}{\pi} \int_0^{E_F} d\varepsilon \arctan \left[\frac{8\pi^2 j^2 T_i T_j J_0(kR) Y_0(kR)}{((\varepsilon_i - \varepsilon)^2 - j^2)((\varepsilon_j - \varepsilon)^2 - j^2)} \right], \quad (5.75)$$

где $j = JA|I||s|$, E_F – энергия Ферми дырок в квантовой яме (полагаем нулевую температуру), $k = \sqrt{2m\varepsilon}/\hbar$,

Резонансный случай соответствует ситуации, когда связанные состояния на обоих ионах лежат в диапазоне энергия заполненных состояний дырок в квантовой яме:

$$\varepsilon_i, \varepsilon_j \in [0, E_F]. \quad (5.76)$$

В этом случае основной вклад в энергию косвенного обмена (5.75) дают полюса аргумента арктангенса, этот вклад можно оценить как:

$$\begin{aligned} E_{ij} &\approx \gamma \sqrt{jT}, & \text{при } \beta > 1 \\ E_{ij} &\approx \gamma \beta \sqrt{jT}, & \text{при } \beta < 1 \\ \beta &= \frac{\sqrt{jT}}{|\varepsilon_i - \varepsilon_j|}, \quad T = \sqrt{T_i T_j}. \end{aligned} \quad (5.77)$$

Здесь γ обозначает конструкцию:

$$\gamma = \sqrt{2\pi} [J_0(k_i R_{ij}) Y_0(k_i R_{ij}) + J_0(k_j R_{ij}) Y_0(k_j R_{ij})]^{1/4}, \quad (5.78)$$

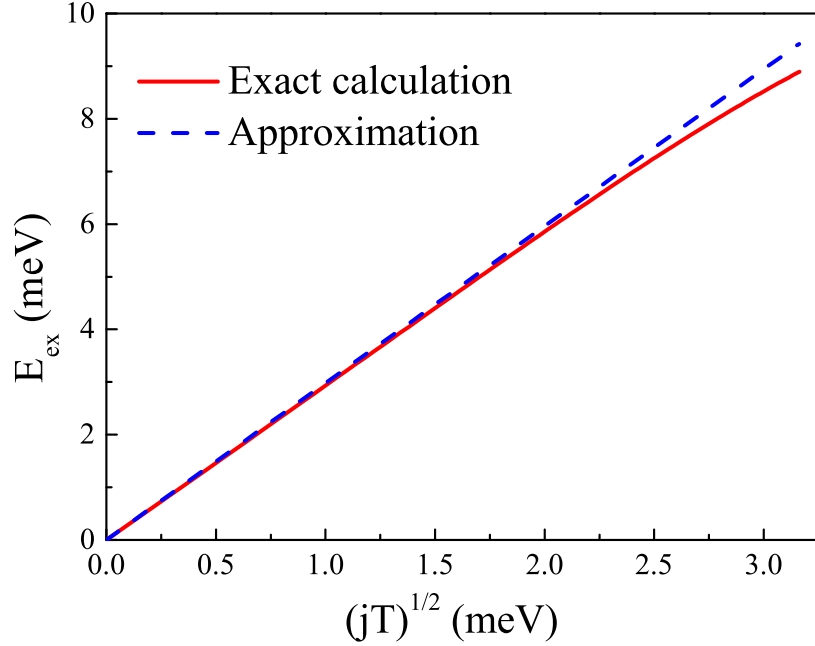


Рис. 5.11: Аппроксимация энергии резонансного косвенного обмена (пунктирная кривая) в сравнении с результатом точного расчета (сплошная линия).

где R_{ij} – расстояние между ионами. В отличие от теории РККИ вместо, фермиевского волнового вектора k_F в выражение для энергии входят резонансные волновые вектора, соответствующие энергиям связанных состояний: $k_i = \sqrt{2m\varepsilon_i}/\hbar$. Для реальной экспериментальной ситуации, обсуждаемой ниже параметр γ оказывается близок к единице $\gamma \approx 1$, далеко от первого максимума осцилляций. Аппроксимация (5.77) очень близка к точному ответу, как показано на Рис.5.11. Пунктирная кривая показывает результат расчета энергии косвенного обмена по формуле (5.75) для $\varepsilon_i = \varepsilon_j = \varepsilon_0$, сплошной кривой показана аппроксимация (5.77) полагая $\gamma = 1$.

В резонансном случае энергия косвенного обмена имеет другую параметрическую зависимость от туннельного параметра T и обменного параметра j , чем в нерезонансном случае (5.53), это ведет к значительному усилению косвенного обмена.

Перейдём к анализу гетеротруктур, исследованных экспериментально (деталь-

ное описание структур приведено в работе [115]). Энергетическая диаграмма для системы GaAs/Mn δ -слой/GaAs/ $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ /GaAs, схематически показана на Рис. 5.10,b. Содержание Mn в легирующем слое составляло 0.25-0.3 монослоя, толщина спейсера между слоем Mn и квантовой ямой $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ $d = 3$ нм (при этом слой Mn практически не влияет на подвижность дырок в квантовой яме [109]). Толщина квантовой ямы составляла 10 нм, а глубина контролировалась составом $\text{In } x$. Вследствие диффузии Mn в процессе роста гетероструктуры реальная толщина слоя Mn достигает ≈ 3 нм [154], поэтому естественно ожидать, что ферромагнитные свойства такого слоя схожи с ферромагнетизмом объемного разбавленного магнитного полупроводника (Ga,Mn)As, это подтверждается и экспериментально для структур без квантовой ямы [155]. Однако, образцы, содержащие кроме слоя Mn квантовую яму имеют более высокую температуру Кюри, которая немонотонным образом зависит от глубины квантовой ямы [140]. Эти данные свидетельствуют о существенном вкладе двумерных дырок в квантовой яме в косвенное обменное взаимодействие, ответственное за ферромагнитные свойства структуры. Другим объяснением наблюдаемого эффекта могло бы быть перераспределение дырок между слоем Mn и квантовой ямой. При этом немонотонная зависимость температуры Кюри от концентрации дырок могла бы быть связана с формированием примесной зоны в (Ga,Mn)As. Оптимальный фактор заполнения, обеспечивающий прыжковый транспорт дырок по примесной зоне, равен 0.5, поэтому меняя фактор заполнения от 1 до 0 можно было бы ожидать немонотонное поведение ферромагнитных свойств, обусловленных косвенным обменом через дырки примесной зоны с максимумом при половинном заполнении примесной зоны [156]. Но такое объяснение оказывается несостоятельным [157], в действительности немонотонной зависимости температуры Кюри от концентрации дырок в объемных образцах не наблюдается [158]. Кроме того, в обсуждаемых гетероструктурах концентрация дырок в квантовой яме не превышает $2.3 \times 10^{12} \text{ см}^{-2}$, в то время как в самом слое Mn (с содержанием Mn 0.25-0.3 монослоя) экспериментально уста-

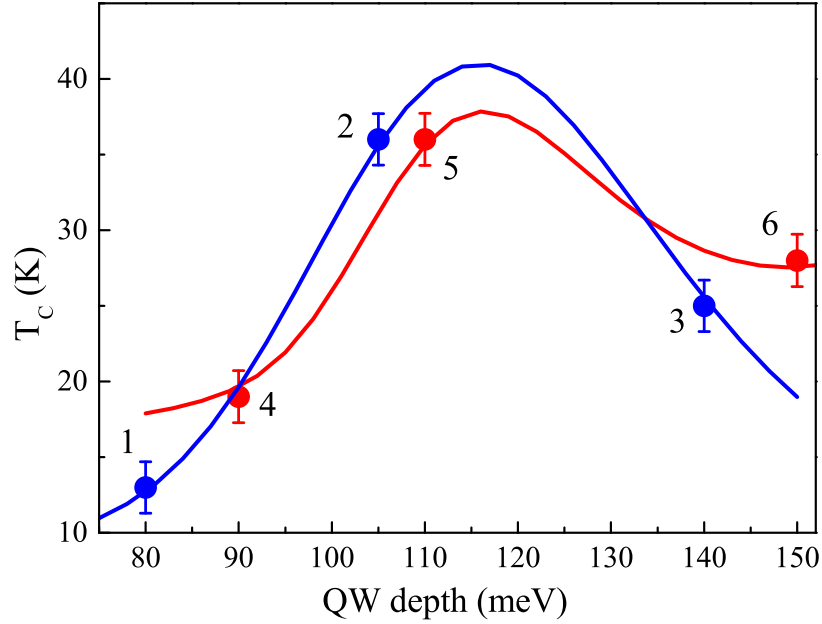


Рис. 5.12: Зависимость температуры Кюри от глубины квантовой ямы. Эксперимент (кружки) и теоретический расчет (сплошные линии).

новленная концентрация дырок составляет не менее 10^{13} см^{-2} [A13] (см. также эксперименты [155]), так что изменения концентрации дырок в квантовой яме не могут вызвать существенного изменения фактора заполнения примесной зоны в слое Mn. С другой стороны, экспериментально установлена спиновая поляризация дырок в квантовой яме вследствие туннельной связи с Mn [153, 109, 159], что дополнительно указывает на их участие в косвенном обмене. При этом энергия акцепторного уровня Mn в GaAs сравнима с глубиной квантовой ямы для дырок, образуемой профилем валентной зоны в рассматриваемых гетроструктурах, поэтому оказывается выполнено условие резонансной связи (5.76), как показано на Рис. 5.10 b. Здесь ϵ_0 обозначает среднюю энергию связанного состояния дырки на Mn (ноль энергии соответствует первому уровню размерного квантования тяжелых дырок в квантовой яме). Таким образом, в исследуемых гетроструктурах имеются два вклада в ферромагнетизм – первый аналогичен механизму ферромагнетизма объемного разбавленного магнитного полупроводника (Ga,Mn)As. Этот вклад характеризуется температурой Кюри T_{C1} и не зависит от параметров ямы.

Второй вклад, характеризуемый температурой Кюри T_{C2} – косвенный обмен через свободные дырки в квантовой яме.

$$T_C = T_{C1} + T_{C2}, \quad (5.79)$$

Соотношение между двумя вкладами можно установить из сравнения расчетов с экспериментальной зависимостью температуры Кюри от глубины квантовой ямы [140]. Результат такого сравнения приведен на Рис. 5.12. Немонотонная зависимость температуры Кюри связана со вторым вкладом, слишком глубокая или слишком мелкая яма нарушает условие резонанса (5.76) и косвенный обмен через двумерные дырки подавляется. Отметим, что расчеты косвенного обмена через двумерный канал без учета резонансного вклада дают монотонную зависимость температуры Кюри от глубины ямы [160]. При вычислении вклада T_{C2} будем полагать, что энергетические уровни связанных состояний дырки на Mn имеют нормальное распределение со средним значением ε_0 и дисперсией σ_ε . Расстояние между соседними ионами предполагается постоянным, равным среднему R . Для δ -легирования Mn 0.3 монослоя $R \approx 1.5$ нм. Расчеты показывают, что для данной системы учет распределения расстояний, как и варьирование среднего значения практически не сказывается на величине энергии резонансного косвенного обмена. Это связано с чрезвычайно слабой зависимостью параметра γ (5.78) от R вблизи $\gamma = 1$. Напротив, распределение уровней энергии связанных состояний играет важную роль и его учёт необходим. Для этого удобно заменить аппроксимацию (5.77) близкой функцией :

$$\tilde{E}(\varepsilon_i, \varepsilon_j) = \frac{\gamma^2 j T}{|\varepsilon_i - \varepsilon_j| + \gamma \sqrt{j T}} \quad (5.80)$$

С учетом распределения связанных состояний по энергиям резонансный вклад в температуру Кюри T_{C2} (5.79) вычисляется следующим образом:

$$T_{C2} = \frac{2}{k_B} \int_0^{E_F} d\varepsilon \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon' P(\varepsilon) P(\varepsilon') \tilde{E}(\varepsilon, \varepsilon'), \quad (5.81)$$

где:

$$P(\varepsilon) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_\varepsilon} e^{-\frac{(\varepsilon-\varepsilon_0)^2}{2\sigma_\varepsilon^2}}, \quad (5.82)$$

№	T_C , К	U_0 , мэВ	p , см ⁻²	E_F , мэВ	T_{C1} , К	\sqrt{jT} , мэВ	σ_ε , мэВ
1	13	80	5.6×10^{11}	7.8	9	3.3	18
2	36	105	8.9×10^{11}	12.5	9	3.3	18
3	25	140	1.8×10^{12}	25.2	9	3.3	18
4	19	90	0.7×10^{11}	1.0	17	4.1	13
5	36	110	3.0×10^{11}	4.2	17	4.1	13
6	28	150	2.3×10^{12}	32.2	17	4.1	13

Таблица 5.1: Параметры расчета

k_B – постоянная Больцмана. В предельном случае δ -образного распределения $\sigma_\varepsilon \rightarrow 0$ выражение (5.81) даёт:

$$T_{C2} = \begin{cases} \frac{2}{k_B} \gamma \sqrt{jT}, & \varepsilon_0 \in [0, E_F] \\ 0, & \text{в противном случае} \end{cases}, \quad (5.83)$$

т.е. резонансный вклад пропадает как только ε_0 оказывается вне энергетического диапазона заполненных состояний в квантовой яме.

Экспериментальная зависимость T_C от глубины ямы получена для двух серий образцов. В образцах 1-3 содержание Mn составляло 0.25 монослоя, а глубина квантовой ямы для дырок варьировалась от 80 до 140 мэВ, в образцах 4-6 содержание Mn составляло 0.3 монослоя, а глубина U_0 изменялась от 90 до 150 мэВ. Сравнение расчета и экспериментальных данных приведено на Рис.5.12. Наилучшее согласие достигается для средней энергии локализованного состояния $\varepsilon_0 = U_0 - 103$ мэВ, т.е. на 103 мэВ выше потолка валентной зоны GaAs, что хорошо согласуется с энергией активации акцепторного уровня Mn (≈ 110 мэВ). Это значение, обеспечивающее наилучшее согласие расчета с экспериментом, одинаково для двух серий образцов. Концентрация дырок в квантовой яме (и уровень Ферми) не является подгоночным параметром, эти данные известны из экспериментов по транспорту в плоскости квантовой ямы [115],[109], глубина ямы известна из данных оптических экспериментов. Эти данные приведены в Таблице 5.1 вместе с остальными подгоночными параметрами расчета - температурой внутри-слоевого вклада T_{C1} , дисперсией распределения энергий связанных состояний σ_ε и произведением обменного и туннельного параметров jT . Как видно из Таблицы 5.1, для образцов

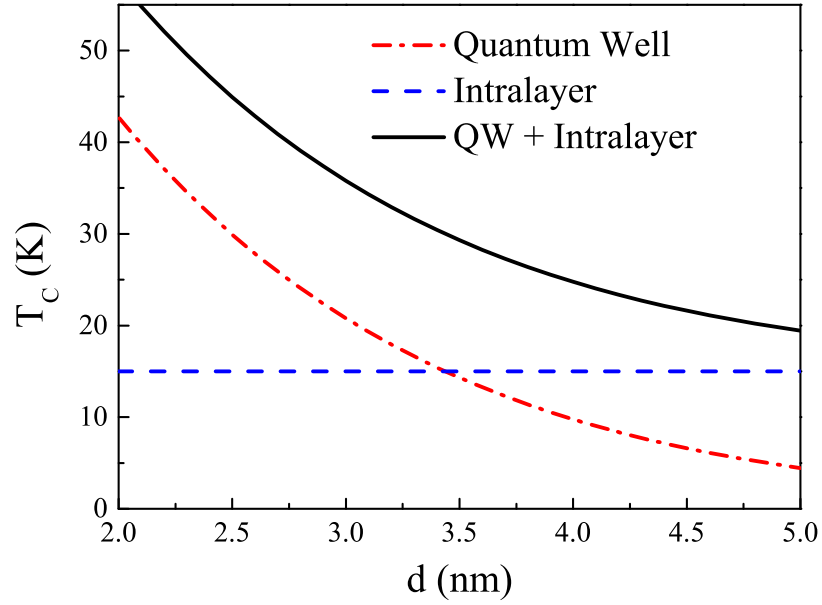


Рис. 5.13: Расчет зависимости температуры Кюри от расстояния между слоем Mn и квантовой ямой.

4-6 T_{C1} выше, чем для образцов 1-3, что является следствием более низкого содержания Mn в последних. Кроме того, для образцов с более высоким содержанием Mn произведение jT оказывается больше. Этот результат вполне согласуется с данными о значительном увеличении толщины слоя Mn вследствие диффузии [115]. Увеличение номинальной концентрации Mn в процессе роста гетероструктуры приводит к увеличению толщины слоя и, следовательно, уменьшению толщины потенциального барьера между квантовой ямой и слоем Mn, т.е. к увеличению туннельного параметра T . Разница в дисперсии энергетических уровней для разных групп образцов показывает, что диагональный энергетический беспорядок несколько меньше в структурах с более высокой концентрацией марганца. В целом, расчет показывает хорошее согласие с экспериментальными данными при разумных значениях подгоночных параметров.

Взаимосвязь между двумя вкладами в ферромагнетизм, очевидно, зависит от расстояния d между квантовой ямой и ионами Mn. На Рис. 5.13 построены критические температуры для обоих вкладов в зависимости от d . Для этого расчета были взяты параметры, соответствующие образцу 5 и варьировалось расстояние

d . “Внутрислоевой” вклад (слагаемое T_{C1}) не зависит от d , а вклад от квантовой ямы зависит посредством туннельного параметра. Для резонансного случая эта зависимость слабее, чем для нерезонансного, а именно $T_{C2} \sim \sqrt{T}$ (5.77), в то время как для нерезонансного $T_{C2} \sim T^2$ (5.53). Несмотря на это, зависимость $T_C(d)$, наблюдаемая в эксперименте, еще более слабая [140], что по-видимому, связано с неточностью в определении расстояния d , которое сравнимо с толщиной самого слоя Mn (≈ 3 нм).

5.5 Краткие итоги

В главе 5 получены следующие основные результаты:

- Предложена теория резонансного косвенного обменного взаимодействия в гетероструктурах. Теория описывает косвенное обменное взаимодействие магнитных ионов через проводящий канал, отделенный потенциальным барьером. Физический принцип взаимодействия в аналогичен взаимодействию Рудермана-Киттеля-Касуя-Йосиды (РККИ), ключевое отличие предложенной теории заключается в учете резонансной гибридизации связанного состояния на примеси с проводящим каналом.
- Разработан теоретический подход, не использующий теорию РККИ и, поэтому, применимый для случая резонансной туннельной связи. Показано, что резонансный косвенный обмен приводит к усилению ферромагнитного взаимодействия.
- Предложенная теория объясняет немонотонную зависимость температуры Кюри от глубины квантовой ямы в гетероструктурах на основе InGaAs с пространственно отделенным слоем Mn.

Глава 6

Резонансное косвенное обменное взаимодействие в структурах на основе графена

6.1 Введение

Магнетизм в графене привлекает значительное внимание исследователей. Как и в полупроводниковой спинтронике, интерес обусловлен поиском решений по интегрированию магнитных и спиновых принципов в полупроводниковую приборную базу [161]. Основными направлениями исследований являются магнетизм, обусловленный дефектами кристаллической решетки, парамагнитными состояниями на краю графена [162], кроме того большое число экспериментальных и теоретических работ посвящено легированию графена магнитными примесями [162, 163, 164, 165, 166, 167]. В отличие от объемных разбавленных магнитных полупроводников, плотность нанесения магнитных ионов на поверхность графена не ограничена пределом растворимости. Магнитные атомы, нанесенные на поверхность графена в небольшой концентрации могут участвовать в косвенном обменном взаимодействии через свободные носители заряда в графене. Такая же ситуация возможна в других двумерных кристаллических материалах, таких как двумерные диалкогениды переходных металлов с магнитными атомами [168, 169]. РККИ-взаимодействие (т.е. косвенное обменное взаимодействие

через свободные носители) между магнитными примесями в графене широко исследовалось в теоретических работах [163, 170, 171, 172, 173, 174, 175, 176]. Было показано, что характер взаимодействия ключевым образом зависит от расположения магнитных центров по отношению к подрешеткам графена А и В. Если магнитные центры расположены в узлах одной и той же подрешетки, косвенное обменное взаимодействие оказывается ферромагнитным на малых расстояниях, а если две магнитные примеси расположены в узлах разных подрешеток, то взаимодействие носит антиферромагнитный характер. Именно поэтому экспериментальное наблюдение ферромагнетизма (или антиферромагнетизма) в графене, легированном магнитными примесями представляется затруднительным – при случайном расположении примесей магнитные взаимодействия противоположных знаков скомпенсируются. Для нелегированного графена с уровнем Ферми в нулевой точке теоретические расчеты энергии РККИ-взаимодействия [170, 171, 172, 174, 175, 163] дают зависимость от расстояния R между магнитными центрами $\sim 1/R^3$, а для легированного графена эта зависимость $\sim 1/R^2$ [171, 176] .

В настоящей главе будет рассмотрено магнитное взаимодействие адатомов на поверхности графена и углеродных нанотрубок с позиций теории резонансного косвенного обмена, изложенной в §5.3. Как и в теории резонансного косвенного обмена для полупроводниковых гетероструктур (Глава 5), резонансное туннелирование носителей из графена на связанные состояния на адатомах приводит к усилению косвенного обмена. Кроме того, как будет показано, для резонансного косвенного обмена качественно меняется зависимость взаимодействия от положения адатомов относительно решетки графена.

6.2 Общая теория косвенного обменного взаимодействия в структурах на основе графена

6.2.1 Эффективный гамильтониан графена в приближении ближайших соседей

Кристаллическая решетка графена представляет собой треугольную решетку с базисом из двух атомов углерода в элементарной ячейке, образующих две подрешетки А,В (см Рис. 6.1 из обзора [177]). Векторы решетки:

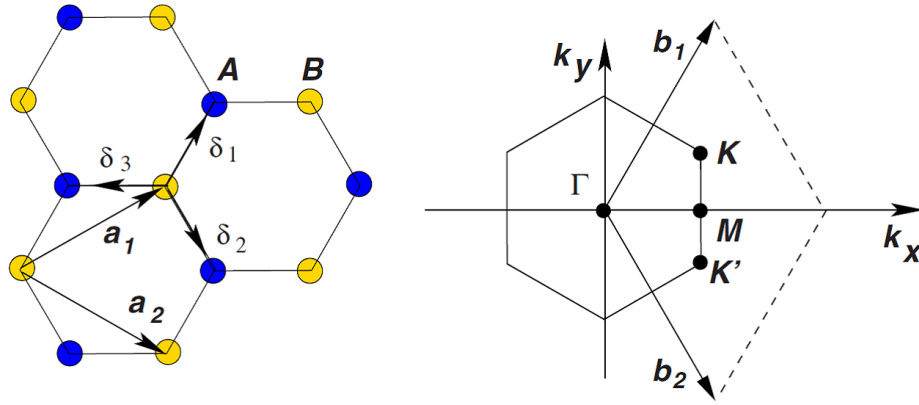


Рис. 6.1: Прямая и обратная решетки графена, иллюстрация из статьи [177]

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2} (3, \sqrt{3}), \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2} (3, -\sqrt{3})$$

, где $a \approx 1.42\text{\AA}$. Векторы обратной решетки, соответственно

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3a} (1, \sqrt{3}), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{3a} (1, -\sqrt{3}).$$

Особенно важную роль играют точки дираковские \mathbf{K} и \mathbf{K}' в углах зоны Бриллюэна обратной решетки (Рис. 6.1) с координатами

$$\mathbf{K} = \left(\frac{2\pi}{3a}, \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right), \quad \mathbf{K}' = \left(\frac{2\pi}{3a}, -\frac{2\pi}{3\sqrt{3}a} \right).$$

Энергетический спектр графена можно получить из гамильтониана сильной связи [177, 162], в приближении ближайших соседей он имеет вид:

$$H_{Gr} = -t \sum_{i,j,\sigma} (a_{\sigma,i}^+ b_{\sigma,j} + h.c.), \quad (6.1)$$

где a^+ , a - операторы рождения и уничтожения состояний в узлах подрешетки А, b^+ , b - в узлах подрешетки В, i, j нумеруют узлы решетки, σ - спиновая переменная, t - прыжковый параметр $t \approx 2.8$ эВ. Гамильтониан (6.1) даёт спектр, состоящий из двух подзон:

$$E_{\pm}(\mathbf{k}') = \pm t \sqrt{3 + f(\mathbf{k}')},$$

$$f(\mathbf{k}') = 2 \cos(\sqrt{3}k'_y a) + 4 \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k'_y a\right) \cos\left(\frac{3}{2}k'_x a\right), \quad (6.2)$$

где $\mathbf{k}' = (k'_x, k'_y)$ - двумерный волновой вектор. Вблизи точки \mathbf{K}' спектр (6.2) имеет вид:

$$E_{\pm}(\mathbf{p}) \approx \pm v_F |\mathbf{p}|,$$

где импульс $\mathbf{p} = \hbar(\mathbf{k}' - \mathbf{K})$, v_F - скорость Ферми, $v_F = 3ta/2\hbar \approx 10^6$ м/с, такой же спектр возникает вблизи \mathbf{K}' . таким образом имеются две зоны, зона проводимости (электроны) и валентная зона (дырки) и две долины K, K' с линейным спектром, это приближение и будет использоваться в дальнейшем. Таким образом, в k - представлении гамильтониан (6.1) можно записать в виде:

$$H_{Gr} = v_F \sum_{\mathbf{p}} (|\mathbf{p}| \hat{c}_{\mathbf{p}K}^+ \hat{c}_{\mathbf{p}K} - |\mathbf{p}| \hat{d}_{\mathbf{p}K}^+ \hat{d}_{\mathbf{p}K} + |\mathbf{p}| \hat{c}_{\mathbf{p}K'}^+ \hat{c}_{\mathbf{p}K'} - |\mathbf{p}| \hat{d}_{\mathbf{p}K'}^+ \hat{d}_{\mathbf{p}K'}), \quad (6.3)$$

где $\hat{c}_{\mathbf{p}(K,K')}^+$, $\hat{d}_{\mathbf{p}(K,K')}^+$, $\hat{c}_{\mathbf{p}(K,K')}$, $\hat{d}_{\mathbf{p}(K,K')}$ - операторы рождения и уничтожения электронов (с) и дырок (d) с импульсом \mathbf{p} в долинах K и K' , соответственно.

6.2.2 Общая теория для структур на основе графена

Постановка задачи о косвенном обмене между магнитными адатомами на поверхности графена схематически проиллюстрирована на Рис. 6.2 и Рис. 6.3. Два магнитных центра $i = 1, 2$ расположены на поверхности углеродной нанотрубки или графена. Для определенности ниже будем говорить об адатомах, однако такими центрами могут быть как отдельные адатомы, так и молекулярные комплексы, нанесенные на поверхность графена или углеродной нанотрубки [178]. Расстояние R между адатомами значительно больше постоянной решетки, так что прямое обменное взаимодействие между ними отсутствует. Два магнитных адатома

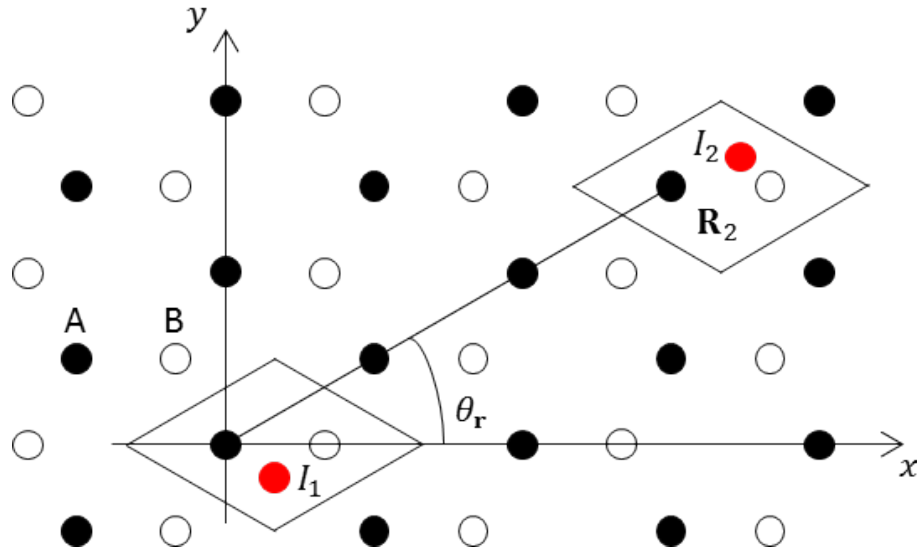


Рис. 6.2: Иллюстрация косвенного обменного взаимодействия между адатомами на поверхности графена. Черные и белые кружки обозначают атомы углерода в двух различных подрешетках А и В, соответственно. Параллелограммы обозначают элементарную решетку графена. Два адатома (обозначенные красными кружками) со спинами I_1, I_2 связаны с обеими подрешетками А и В.

обладают спинами, обозначенными I_1, I_2 (здесь и далее имеются в виду спины незаполненных электронных оболочек), уровни энергии связанных состояний на адатомах равны, соответственно ϵ_1, ϵ_2 . Хвосты волновых функции связанных состояний электронов на адатомах проникают в графен и обеспечивают перекрытие с волновыми функциями носителей в графене. Связь адатомов с графеном будем описывать в рамках туннельного гамильтониана, таким образом общая методика расчета оказывается схожей с теорией §5.3. Запишем полный гамильтониан для графена с двумя магнитными адатомами в виде :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_T + \hat{H}_J, \quad (6.4)$$

где \hat{H}_0 описывает невзаимодействующие адатомы и графен, \hat{H}_T – слагаемое, описывающее связь адатомов с графеном, \hat{H}_J описывает обменное взаимодействие спинов адатомов с электронами графена, протуннелировавшими на адатом.

Как и ранее, будем рассматривать режим слабой обменной связи, так что эффективный гамильтониан косвенного обменного взаимодействия между адатома-

ми имеет вид $\hat{V}_{eff} \sim (\hat{\mathbf{I}}_1 \cdot \hat{\mathbf{I}}_2)$. В этом режиме для вычисления энергии косвенного обменного взаимодействия можно заменить операторы спина магнитных адатомов $\hat{\mathbf{I}}_{1,2}$ классическими магнитными моментами $\mathbf{I}_{1,2}$ [172]. Режим слабой обменной связи для графена означает $j/t \ll 1$, где j – характерная энергия обменного взаимодействия, t – прыжковый параметр гамильтониана графена (6.1). В режиме слабой обменной связи магнитные моменты адатомов играют роль параметров, задающих потенциал взаимодействия, так что гамильтониан (6.4) оказывается различным для параллельной и антипараллельной конфигураций спинов адатомов. Соответствующая разность энергий интерпретируется как энергия косвенного обменного взаимодействия [172, 163, 173]:

$$E_{ex} = E_{\uparrow\uparrow} - E_{\uparrow\downarrow}. \quad (6.5)$$

Обменный гамильтониан \hat{H}_J определяет контактное взаимодействие электронов со спинами адатомов:

$$\hat{H}_J = J\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_1)\hat{\mathbf{S}}\mathbf{I}_1 + J\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_2)\hat{\mathbf{S}}\mathbf{I}_2, \quad (6.6)$$

где $\hat{\mathbf{S}}$ – оператор спина электрона, $\mathbf{I}_{1,2}$ – спины адатомов, J – обменная константа, $\mathbf{R}_{1,2}$ – расстояние между адатомами. Каждый магнитный адатом в общем случае

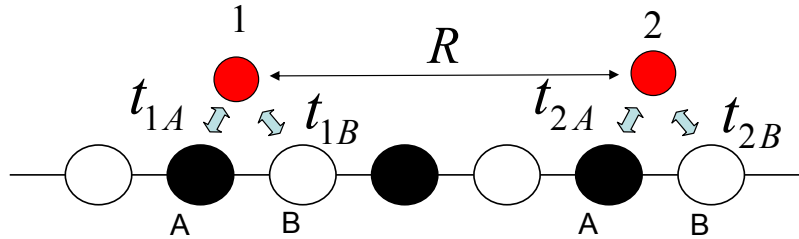


Рис. 6.3: Косвенное обменное взаимодействие в структурах на основе графена. Каждый магнитный адатом 1,2 туннельно связан с атомами двух неэквивалентных подрешеток графена А,В

связан с двумя неэквивалентными подрешетками графена А, В, как это схематически проиллюстрировано на Рис. 6.3. Слагаемые полного гамильтониана (6.4) для графена с двумя адатомами с учетом (6.3) в данном случае имеют следующий

вил:

$$\begin{aligned}
\hat{H}_0 &= \varepsilon_1 \hat{f}_1^+ \hat{f}_1 + \varepsilon_2 \hat{f}_2^+ \hat{f}_2 + v_F \sum_{\mathbf{p}} (|\mathbf{p}| \hat{c}_{\mathbf{p}K}^+ \hat{c}_{\mathbf{p}K} - \\
&\quad - |\mathbf{p}| \hat{d}_{\mathbf{p}K}^+ \hat{d}_{\mathbf{p}K} + |\mathbf{p}| \hat{c}_{\mathbf{p}K'}^+ \hat{c}_{\mathbf{p}K'} - |\mathbf{p}| \hat{d}_{\mathbf{p}K'}^+ \hat{d}_{\mathbf{p}K'}), \\
\hat{H}_T &= t_{1A} \hat{a}_{R_1}^+ \hat{f}_1 + t_{1B} \hat{b}_{R_1}^+ \hat{f}_1 + t_{2A} \hat{a}_{R_2}^+ \hat{f}_2 + t_{2B} \hat{b}_{R_2}^+ \hat{f}_2 + h.c., \\
\hat{H}_J &= j_1 \hat{f}_1^+ \hat{f}_1 + j_2 \hat{f}_2^+ \hat{f}_2.
\end{aligned} \tag{6.7}$$

где $\varepsilon_{1,2}$ - энергии связанных состояний на адатомах, $\hat{f}_{1,2}^+, \hat{f}_{1,2}$ - операторы рождения и уничтожения связанных состояний на адатомах, $j_{1,2} = JSI_{1,2}|\varphi(0)|^2$, где $S, I_{1,2}$ - проекции спина электрона и адатомов, соответственно, $\varphi(0)$ - амплитуда волновой функции связанного состояния на адатоме. Для того, чтобы учесть положение магнитного адатома относительно решетки графена здесь введены два комплексных туннельных параметра, описывающие туннельную связь магнитного адатома с двумя неэквивалентными подрешетками графена A и B t_{iA}, t_{iB} , $i = 1, 2$ (Рис. 6.3). В теории существенно различные результаты получаются для случаев, когда адатомы преимущественно связаны с одной и той же подрешеткой (AA конфигурация) или с двумя различными подрешетками (AB конфигурация). Общий случай с произвольными значениями параметров t_{iA}, t_{iB} охватывает обе эти крайние ситуации, как и любые промежуточные. Туннельная часть гамильтониана \hat{H}_T в (6.7) записана в координатном представлении, $\hat{a}_{R_i}^+, \hat{b}_{R_i}^+$ - операторы рождения для состояний в графене на A и B подрешетках в реальном пространстве, они имеют индексы R_i , обозначающие координаты адатома в плоскости. Часть гамильтониана \hat{H}_0 (6.7), описывающая собственно графен написана в импульсном представлении, поэтому к импульсному представлению следует привести и туннельную часть. Рассмотрим конечный кусок графена или нанотрубки, содержащий N элементарных ячеек. При этом состояния с определенным значением импульса электрона в графене образуют дискретный спектр. С помощью гамильтониана сильной связи графена (6.1) можно выразить операторы в координатном

пространстве через операторы в импульсном пространстве следующим образом:

$$\begin{aligned}
 \hat{a}_{R_n} &= e^{-i\mathbf{K}\mathbf{R}_n} \sum_{\mathbf{p}} \frac{e^{-i\mathbf{p}\mathbf{R}_n}}{\sqrt{N}} e^{-i\theta_{\mathbf{p}}} \frac{\hat{c}_{\mathbf{p}}^K + \hat{d}_{\mathbf{p}}^K}{\sqrt{2}} + \\
 &+ e^{-i\mathbf{K}'\mathbf{R}_n} \sum_{\mathbf{p}} \frac{e^{-i\mathbf{p}\mathbf{R}_n}}{\sqrt{N}} e^{i\theta_{\mathbf{p}}} \frac{\hat{c}_{\mathbf{p}}^{K'} + \hat{d}_{\mathbf{p}}^{K'}}{\sqrt{2}}, \\
 \hat{b}_{R_n} &= - e^{-i\mathbf{K}\mathbf{R}_n} \sum_{\mathbf{p}} \frac{e^{-i\mathbf{p}\mathbf{R}_n}}{\sqrt{N}} \frac{\hat{c}_{\mathbf{p}}^K - \hat{d}_{\mathbf{p}}^K}{\sqrt{2}} - \\
 &- e^{-i\mathbf{K}'\mathbf{R}_n} \sum_{\mathbf{p}} \frac{e^{-i\mathbf{p}\mathbf{R}_n}}{\sqrt{N}} \frac{\hat{c}_{\mathbf{p}}^{K'} - \hat{d}_{\mathbf{p}}^{K'}}{\sqrt{2}},
 \end{aligned} \tag{6.8}$$

где \mathbf{R}_n – координаты атома углерода подрешетки A , $\theta_{\mathbf{p}}$ – полярный угол вектора импульса \mathbf{p} (система координат аналогична принятой в [177], Рис. 6.1).

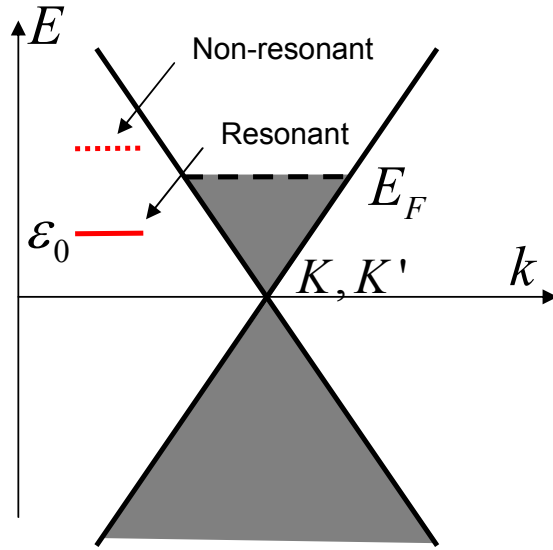


Рис. 6.4: Положение уровня связанного состояния относительно спектра графена, резонансный и нерезонансный случаи.

Гамильтониан (6.7) удается диагонализировать аналитически как в одномерном (углеродные нанотрубки), так и в двумерном (графен) случае. Решение задачи состоит в нахождении спектра гамильтониана (6.7) и вычислении разности энергий многоэлектронной системы для параллельной и антипараллельной конфигурации спинов адатомов. Эта разность интерпретируется как энергия косвенного обмена.

Полученные таким образом аналитические выражения для энергии косвенного обмена охватывают как резонансный, так и нерезонансный случаи. Оба случая схематически изображены на Рис. 6.4. В нерезонансном случае локализованный уровень лежит выше уровня Ферми графена (или нанотрубки) E_F , в резонансном случае - ниже.

6.3 Резонансный косвенный обмен в углеродных нанотрубках.

Углеродные нанотрубки являются одномерной реализацией структуры на основе графена, они представляют собой протяженные цилиндрические структуры, состоящие из свернутых в трубку графеновых плоскостей. Углеродные нанотрубки являются одним из немногочисленных примеров одномерных объектов в современной физике твердого тела, технология получения которых хорошо развита и позволяет получать структуры очень высокого качества, что вызывает значительный интерес к этим объектам, как с теоретической, так и прикладной точек зрения [179]. Для углеродных нанотрубок с магнитными центрами построена теория РККИ [180], в настоящем разделе мы проанализируем эффект резонансного косвенного обмена для этих систем.

Будем рассматривать одну подзону размерного квантования, энергетический спектр имеет две долины с линейным законом дисперсии как показано схематически на Рис. 6.4, имеющиеся свободные носители обеспечивают косвенный обмен между магнитными атомами или молекулярными комплексами на поверхности нанотрубки. В одномерном случае двумерный вектор импульса \mathbf{p} в (6.7) следует заменить скалярной величиной (со знаком) $p = \pm|p|$, а выражение (6.8) несколько

упрощается:

$$\begin{aligned}\hat{a}_{R_i} &= \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_p \left[\begin{array}{l} e^{-iKR_i} e^{-ipR_i} \left(\hat{c}_{pK} + \hat{d}_{pK} \right) \\ + e^{-iK'R_i} e^{-ipR_i} \left(\hat{c}_{pK'} + \hat{d}_{pK'} \right) \end{array} \right] \\ \hat{b}_{R_i} &= \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_p \left[\begin{array}{l} e^{-iKR_i} e^{-ipR_i} \frac{p}{|p|} \left(\hat{c}_{pK} - \hat{d}_{pK} \right) \\ - e^{-iK'R_i} e^{-ipR_i} \frac{p}{|p|} \left(\hat{c}_{pK'} - \hat{d}_{pK'} \right) \end{array} \right].\end{aligned}\quad (6.9)$$

Диагонализация (6.7) с использованием (6.9) осуществляется методом, изложенным в §5.3.2, а именно - вычисляется разность энергий конечной системы с дискретными уровнями для параллельной и антипараллельной конфигураций спинов ионов, далее размер системы устремляется к бесконечности. Для двумерного случая графена эта процедура более подробно описана в §6.4. В результате, получаем следующее выражение для энергии косвенного обмена:

$$\begin{aligned}E_{ex} &= \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{E_F} d\varepsilon \arctan \left[\frac{j^2 f(R, \varepsilon)}{((\varepsilon - \varepsilon_0)^2 - j^2)^2} \right], \\ f(R, \varepsilon) &= T_{AA}^2 \cos^2(KR) \sin(2|\varepsilon|R) \\ &\quad - T_{AB}^2 \sin^2(KR) \sin(2|\varepsilon|R) \\ &\quad + \gamma T_{AA} T_{AB} \sin(2KR) \operatorname{sign} \varepsilon \cos(2\varepsilon R),\end{aligned}\quad (6.10)$$

где R - расстояние между адатомами, величины T_{AA}, T_{AB} отражают вклад АА и АВ конфигураций, соответственно:

$$\begin{aligned}\frac{2}{3} t (t_{1A}^* t_{2A} + t_{1B}^* t_{2B}) &\equiv T_{AA} e^{i\alpha_{AA}} \\ \frac{2}{3} t (t_{1B}^* t_{2A} + t_{1A}^* t_{2B}) &\equiv T_{AB} e^{i\alpha_{AB}}, \\ \gamma &= \cos(\alpha_{AA} - \alpha_{AB}),\end{aligned}\quad (6.11)$$

K - x компонента волнового вектора дираковской точки. Пусть в результате легирования или приложения электрического поля затвора уровень Ферми E_F в нанотрубке лежит в зоне проводимости. Нерезонансный случай соответствует ситуации, когда уровни локализованных состояний адатомов лежат существенно

выше энергии E_F . Тогда интегрирование (6.10) дает:

$$E_{nr} = \frac{\hbar v_F j^2}{2\pi\epsilon_0^4 R} \begin{bmatrix} -T_{AA}^2 (1 + \cos(2KR)) \cos(2k_F R) \\ +T_{AB}^2 (1 - \cos(2KR)) \cos(2k_F R) \\ +\gamma T_{AA} T_{AB} \sin(2KR) \sin(2k_F R) \end{bmatrix}. \quad (6.12)$$

Если оба адатома связаны только с одной подрешеткой, тогда $T_{AA} \neq 0, T_{AB} = 0$. Наоборот, если адатомы находятся над узлами разных подрешеток, то есть речь идет о конфигурации АВ, тогда $T_{AA} = 0, T_{AB} \neq 0$. В этих двух случаях формула для нерезонансного случая (6.12) согласуется с результатами расчетов косвенного обменного взаимодействия в углеродных нанотрубках с помощью теории РККИ [180]. На Рис.6.5 показана зависимость энергии косвенного обмена от расстоя-

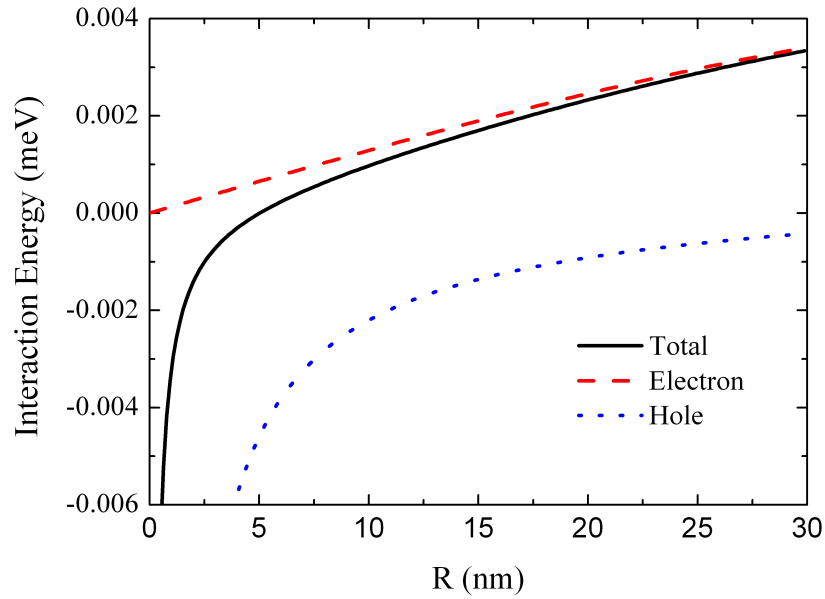


Рис. 6.5: Энергия косвенного обменного взаимодействия в зависимости от расстояния между магнитными центрами на поверхности углеродной нанотрубки в нерезонансном случае для АА конфигурации.

ния между адатомами в нерезонансном случае, вычисленная по формуле (6.12). Расчет проведен для легированной нанотрубки n -типа, $E_F = 10$ мэВ, $j = 0.1E_F$, $\epsilon_0/E_F = 1.3$ (нерезонансный случай), $T_{AA} = 0.1E_F$, $T_{AB} = 0$ (конфигурация АА). Как видно из Рис. 6.5 вклад в косвенное обменное взаимодействие дают как дырки

(эти состояния соответствуют в (6.10) интервалу интегрирования $\varepsilon \in (-\infty, 0)$), так и электроны ($\varepsilon \in (0, E_F)$). На расстоянии несколько нанометров между магнитными центрами вклад дырок преобладает и взаимодействие является ферромагнитным, для больших расстояний вклад электронов становится больше и взаимодействие становится антиферромагнитным. Пример резонансного случая показан

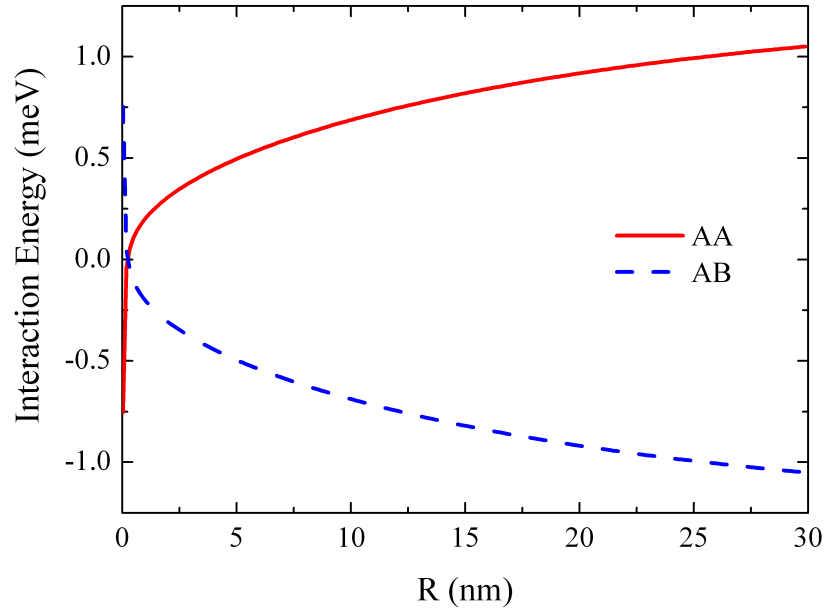


Рис. 6.6: Энергия косвенного обменного взаимодействия в зависимости от расстояния между магнитными центрами на поверхности углеродной нанотрубки в резонансном случае для AA конфигурации (сплошная линия) и AB конфигурации (пунктирная линия).

на Рис.6.6. Энергия связанного состояния лежит в диапазоне заполненных состояний нанотрубки, $\varepsilon_0/E_F = 0.8$. Рис.6.6 демонстрирует результаты расчета (6.10) для AA конфигурации ($T_{AA} = 0.1E_F$, $T_{AB} = 0$) и AB конфигурации ($T_{AA} = 0$, $T_{AB} = 0.1E_F$). Для этих двух случаев характер магнитного взаимодействия оказывается различным (противоположным), как и в теории РККИ для решетки графена [181]. Величина энергии взаимодействия в резонансном случае оказывается значительно выше, чем в нерезонансном, это ясно видно на Рис. 6.5, Рис. 6.6. Поскольку энергия связанного состояния лежит в электронной части спектра, вклад дырок остается нерезонансным и, поэтому, оказывается пренебрежимо малым по сравнению с вкладом электронов, таким образом в случае резонансного косвен-

ного обмена основной вклад вносят носители из области спектра вблизи энергии связанного состояния [A12].

6.4 Резонансный косвенный обмен в графене

6.4.1 Введение

Рассмотрим резонансное косвенное обменное взаимодействие в графене с магнитными адатомами в двумерном случае, т.е. собственно в листе графена. Для магнитных адатомов, слабо связанных с графеном, РККИ взаимодействие подавлено на величину $\exp(-4d/d_0)$ где d – расстояние между адатомом и графеном, d_0 – характеристическая длина затухания волновой функции графена в направлении нормали к поверхности. С другой стороны, если магнитная примесь на поверхности графена имеет резонансное связанное состояние с энергетическим уровнем, лежащем в диапазоне заполненных состояний графена $\varepsilon_0 \in (-\infty, E_F)$ (E_F – энергия Ферми), ситуация кардинальным образом меняется и следует ожидать усиления косвенного обмена из-за эффективной связи магнитного адатома с носителями в графене. Причем, как будет показано ниже, резонансная связь приводит не только к усилению взаимодействия. В двумерном графене (в отличие от углеродных нанотрубок, рассмотренных в §6.3), в случае резонансного обмена характер магнитного взаимодействия (антиферромагнитное или ферромагнитное) зависит только от энергии локализованного состояния на адатоме, но не зависит от расположения адатомов на поверхности графена. Этот результат кардинально отличается от результатов расчетов косвенного обмена в графене по теории РККИ.

6.4.2 Метод расчета

Рассмотрим два магнитных адатома на поверхности графена, схематически постановка задачи изображена на Рис.6.2. Не умаляя общности, будем считать, что первый адатом находится в начале координат $\mathbf{R}_1 = (0, 0)$, а второй адатом расположен в точке $\mathbf{R}_2 = (x, y) = (r, \theta_r)$ в декартовых и полярных координатах,

соответственно.

Гамильтониан (6.7) допускает диагонализацию на дискретном базисе, аналогично методу, изложенному в §5.2.1 [A12]. В качестве невозмущённого дискретного базиса удобно взять спектр графенового диска радиуса L с граничными условиями общего вида [182]. Дискретные уровни энергии в графеновом диске характеризуются радиальным и угловыми квантовыми числами m, n . Задача состоит в диагонализации гамильтониана (6.7) в базисе, сформированном невозмущенными волновыми функциями диска графена радиуса L и связанными состояниями на адатомах.

Собственные функции гамильтониана графена в цилиндрическом базисе имеют вид:

$$\begin{aligned}\psi_{p,n}^K(r, \theta) &= \frac{\sqrt{p}}{2\sqrt{L}} \begin{pmatrix} J_n(pr)e^{in\theta} \\ \pm iJ_{n+1}(pr)e^{i(n+1)\theta} \end{pmatrix} \\ \psi_{p,n}^{K'}(r, \theta) &= \frac{\sqrt{p}}{2\sqrt{L}} \begin{pmatrix} J_n(pr)e^{in\theta} \\ \mp iJ_{n-1}(pr)e^{i(n-1)\theta} \end{pmatrix},\end{aligned}\quad (6.13)$$

где верхний и нижний элементы столбцов относятся к электронам и дыркам, соответственно. Граничные условия для долин K и K' в общем виде записываются следующим образом [182]:

$$\begin{aligned}\hat{\Gamma}_K &= \begin{pmatrix} 1 & i\beta e^{-i\theta} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \hat{\Gamma}_{K'} = \begin{pmatrix} 1 & i\beta e^{i\theta} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \hat{\Gamma}_K \psi_{p,n}^K(r, \theta) \Big|_{r=L} &= 0, \\ \hat{\Gamma}_{K'} \psi_{p,n}^{K'}(r, \theta) \Big|_{r=L} &= 0,\end{aligned}\quad (6.14)$$

здесь параметр β описывает границу графена. С учетом (6.14) получаем энергетические уровни квантования в графеновом диске для долин K и K' :

$$\begin{aligned}|E_{m,n}^{0c}| &= \hbar v_F \left(\frac{\pi m}{L} + \frac{\pi(2n+1)}{4L} - \arctan \frac{\beta}{L} \right) \\ |E_{m,n}^{0d}| &= \hbar v_F \left(\frac{\pi m}{L} + \frac{\pi(2n+1)}{4L} + \arctan \frac{\beta}{L} \right),\end{aligned}\quad (6.15)$$

где индекс c соответствует электронам, а индекс d - дыркам, m, n - целые числа, m - квантованный модуль импульса, n - номер цилиндрической гармоники. Разложим

теперь искомые собственные функции $|\Psi\rangle$ полного гамильтониана (6.7), по базису невозмущенных функций:

$$|\Psi\rangle = (a_1 \hat{f}_1^+ + a_2 \hat{f}_2^+ + b_{pn}^{cK} \hat{c}_{pnK}^+ + b_{pn}^{dK} \hat{d}_{pnK}^+ + b_{pn}^{cK'} \hat{c}_{pnK'}^+ + b_{pn}^{dK'} \hat{d}_{pnK'}^+) |0\rangle, \quad (6.16)$$

где коэффициенты a_i, b_α^β подлежат определению. Индексы p, n характеризуют цилиндрические базисные состояния (6.13). Туннельные матричные элементы в цилиндрическом базисе (6.13) выразим через известные матричные элементы в базисе плоских волн (6.8):

$$t_{1pn}^{cK} = i^{-n} \sqrt{\frac{\pi L p}{2}} \int_0^{2\pi} \frac{d\theta_{\mathbf{p}}}{2\pi} e^{-in\theta_{\mathbf{p}}} \langle 0 | \hat{f}_1 \hat{H}_T \hat{c}_{\mathbf{p}K}^+ | 0 \rangle. \quad (6.17)$$

В результате, в базисе

$$(\hat{f}_1^+ | 0\rangle, \hat{f}_2^+ | 0\rangle, \{\hat{c}_{pnK}^+ | 0\rangle\}, \{\hat{d}_{pnK}^+ | 0\rangle\}, \{\hat{c}_{pnK'}^+ | 0\rangle\}, \{\hat{d}_{pnK'}^+ | 0\rangle\})$$

гамильтониан (6.7) принимает следующий вид:

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 + j_1 & 0 & t_{1pn}^{cK} & t_{1pn}^{dK} & t_{1pn}^{cK'} & t_{1pn}^{dK'} \\ 0 & \varepsilon_2 + j_2 & t_{2pn}^{cK} & t_{2pn}^{dK} & t_{2pn}^{cK'} & t_{2pn}^{dK'} \\ t_{1pn}^{cK*} & t_{2pn}^{cK*} & E_{pn}^{0c} & 0 & 0 & 0 \\ t_{1pn}^{dK*} & t_{2pn}^{dK*} & 0 & E_{pn}^{0d} & 0 & 0 \\ t_{1pn}^{cK'*} & t_{2pn}^{cK'*} & 0 & 0 & E_{pn}^{0c} & 0 \\ t_{1pn}^{dK'*} & t_{2pn}^{dK'*} & 0 & 0 & 0 & E_{pn}^{0d} \end{pmatrix}. \quad (6.18)$$

Определитель соответствующей задачи на собственные значения $H |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle$ приводится к следующей форме 2x2:

$$\begin{vmatrix} \varepsilon_1 + A_1 + j_1 - E & B \\ B^* & \varepsilon_2 + A_2 + j_2 - E \end{vmatrix}, \quad (6.19)$$

где

$$A_i = \sum_{m,n} \left(\frac{t_{ipn}^{cK} t_{ipn}^{cK*}}{E - E_{mn}^{0c}} + \frac{t_{ipn}^{dK} t_{ipn}^{dK*}}{E - E_{mn}^{0d}} + \frac{t_{ipn}^{cK'} t_{ipn}^{cK'*}}{E - E_{mn}^{0c}} + \frac{t_{ipn}^{dK'} t_{ipn}^{dK'*}}{E - E_{mn}^{0d}} \right), \quad (6.20)$$

$$B = \sum_{m,n} \left(\frac{t_{1pn}^{cK} t_{2pn}^{cK*}}{E - E_{mn}^{0c}} + \frac{t_{1pn}^{dK} t_{2pn}^{dK*}}{E - E_{mn}^{0d}} + \frac{t_{1pn}^{cK'} t_{2pn}^{cK'*}}{E - E_{mn}^{0c}} + \frac{t_{1pn}^{dK'} t_{2pn}^{dK'*}}{E - E_{mn}^{0d}} \right). \quad (6.21)$$

Суммирование в (6.20),(6.21) производится по всем базисным состояниям, $m, n = 0, 1, 2, \dots$. Вследствие размерного квантования в диске импульс p в туннельном матричном элементе является дискретным и однозначно связан с индексом m условием квантования (6.14). Индексы c, d обозначают электроны и дырки, соответственно. Уравнение (6.20) описывает сдвиг уровней энергии адатомов из-за взаимодействия со спектром уровней в графене. В дальнейших вычислениях уровни связанных состояний определены с учетом этого сдвига этот сдвига $\varepsilon_i + A_i \rightarrow \varepsilon_i$. Заметим, что A_i имеет порядок T^2 , и, в нашем случае, им можно пренебречь. Уравнение (6.21) описывает взаимодействие между адатомами посредством электронов в графене. Раскрывая (6.19) имеем:

$$\begin{aligned}
& (\varepsilon_1 + j_1 - E)(\varepsilon_2 + j_2 - E) - BB^* = 0, \tag{6.22} \\
B = & \frac{\Omega_{u.c.} E}{4(\hbar v_F)^2} \left\{ \left(e^{i\mathbf{K}\mathbf{R}} + e^{i\mathbf{K}'\mathbf{R}} \right) (t_{1A}t_{2A}^* + t_{1B}t_{2B}^*) \cdot \right. \\
& \cdot (N_0(kr) + J_0(kr) \cot(kL)) + i \left[\left(e^{i\mathbf{K}\mathbf{r} - i\theta_r} + \right. \right. \\
& \left. \left. + e^{i\mathbf{K}'\mathbf{r} + i\theta_r} \right) t_{1A}t_{2B}^* + \left(e^{i\mathbf{K}\mathbf{R} + i\theta_r} + e^{i\mathbf{K}'\mathbf{R} - i\theta_r} \right) \cdot \right. \\
& \left. \left. \cdot t_{1B}t_{2A}^* \right] (N_1(kr) + J_1(kr) \cot(kL)) \right\}, \tag{6.23}
\end{aligned}$$

где $\mathbf{R} = \mathbf{R}_2 - \mathbf{R}_1$, $k = E/\hbar v_F$, $\Omega_{u.c.} = 3\sqrt{3}a^2/2$ – площадь элементарной ячейки графена, a – длина С-С связи в графене, J_i, N_i - функции Бесселя и Неймана i -го порядка. Площадь элементарной ячейки возникает из (6.8) и (6.17), поскольку $L/N = \Omega_{u.c.}/2\pi L$. Корни характеристического многочлена (6.22) можно параметризовать индексами $E_{m,i}$, где m соответствует модулю импульса в невозмущенном состоянии E_m^0 , $i = 1, 2$ обозначает два решения (6.22) в соответствии с числом рассматриваемых адатомов (два). (6.22). При заполнении найденного спектра заданным числом частиц N получим полную энергию системы с взаимодействием. Разность между энергией системы с параллельными спинами адатомов и результатом расчета с антипараллельной конфигурации спинов адатомов даёт эффек-

тивную энергию их косвенного обменного взаимодействия:

$$E_{ex} = \sum_{m,i} \sum_{s=\pm 1/2} [E_{m,i}(\uparrow\uparrow, s) - E_{m,i}(\downarrow\uparrow, s)], \quad (6.24)$$

где $m = 0, 1, 2, \dots$ и $i = 1, 2$ аналогичны радиальному и угловому квантовым числам, соответственно, они характеризуют возмущенные уровни энергии. Суммирование проводится по всем заполненным состояниям. Кроме того, для каждой спиновой конфигурации адатомов ($\uparrow\uparrow$ обозначает сонаправленность спинов обоих адатомов, $\uparrow\downarrow$ обозначает антипараллельную конфигурацию спинов) необходимо просуммировать по проекции спина электрона s . Спиновые конфигурации адатомов и проекция спина электрона входят в (6.18) через комбинацию параметров $j_{1,2}$, которые имеют одинаковую величину $|j_1| = |j_2| \equiv j$, но могут отличаться знаком, например, для $\uparrow\uparrow, s = -1/2$ эти параметры таковы $j_1 = j_2 = -j$. Вычисляя (6.24) и переходя к пределу бесконечного листа графена $L \rightarrow \infty$ получаем следующее выражение для энергии косвенного обмена в ведущем порядке по туннельному параметру:

$$\begin{aligned} E_{ex} = & \int_{-\infty}^{E_F} \frac{dE}{\pi} \arctan \left\{ \frac{j^2 E^2 g(E, r)}{[(\varepsilon_1 - E)^2 - j^2][(\varepsilon_2 - E)^2 - j^2]} \right\} \cdot \\ & \cdot \text{sign}(E) \\ g(E, r) = & \tau_{AA}^4 (1 + \cos(\mathbf{K} - \mathbf{K}') \mathbf{R}) J_0 \left(\frac{|E|r}{\hbar v_F} \right) N_0 \left(\frac{|E|r}{\hbar v_F} \right) + \\ & + [\tau_{1AB}^4 (1 + \cos((\mathbf{K} - \mathbf{K}') \mathbf{R} - 2\theta_r)) + \\ & + \tau_{2AB}^4 (1 + \cos((\mathbf{K} - \mathbf{K}') \mathbf{R} + 2\theta_r)) + \\ & + 2\tau_{1AB}^2 \tau_{2AB}^2 \cos(\alpha_{1AB} - \alpha_{2AB})(\cos(\mathbf{K} - \mathbf{K}') \mathbf{R} + \\ & + \cos(2\theta_r))] J_1 \left(\frac{|E|r}{\hbar v_F} \right) N_1 \left(\frac{|E|r}{\hbar v_F} \right) + \\ & + [\tau_{AA}^2 \tau_{1AB}^2 \sin(\alpha_{AA} - \alpha_{1AB})(\cos((\mathbf{K} - \mathbf{K}') \mathbf{R} - \theta_r)) + \\ & + \tau_{AA}^2 \tau_{2AB}^2 \sin(\alpha_{AA} - \alpha_{2AB})(\cos((\mathbf{K} - \mathbf{K}') \mathbf{R} + \theta_r))] \cdot \\ & \cdot \left(J_0 \left(\frac{|E|r}{\hbar v_F} \right) N_1 \left(\frac{|E|r}{\hbar v_F} \right) + J_1 \left(\frac{|E|r}{\hbar v_F} \right) N_0 \left(\frac{|E|r}{\hbar v_F} \right) \right), \end{aligned} \quad (6.25)$$

$$\begin{aligned}\tau_{AA}^2 e^{i\alpha_{AA}} &= \frac{4}{\sqrt{3}t^2} (t_{1A}t_{2A}^* + t_{1B}t_{2B}^*), \\ \tau_{1AB}^2 e^{i\alpha_{1AB}} &= \frac{4}{\sqrt{3}t^2} t_{1A}t_{2B}^*, \\ \tau_{2AB}^2 e^{i\alpha_{2AB}} &= \frac{4}{\sqrt{3}t^2} t_{1B}t_{2A}^*.\end{aligned}$$

Рассмотрим нерезонансный предельный случай, возникающий при $\varepsilon_{1,2} \gg E_F$, при этом можно положить ($\varepsilon_0 \equiv \varepsilon_1 = \varepsilon_2$), для нелегированного графена будем считать $E_F = 0$. В нерезонансом случае аргумент арктангенса (6.25) не имеет полюсов, арктангенс можно заменить на его аргумент ввиду малости туннельных параметров и обменной константы. Проанализируем две конфигурации: (i) адатомы расположены в узлах одной и той же подрешетки, что означает $T_{AA} = t_{1A} = t_{2A}$, $t_{1B} = t_{2B} = 0$, (ii) адатомы расположены в узлах разных подрешеток, т.е. первый адатом связан только с подрешеткой A , а второй только с подрешеткой B : $T_{AB} = t_{1A} = t_{2B}$, $t_{2A} = t_{1B} = 0$. Для этих двух различных конфигураций в нерезонансном предельном случае получаем :

$$E_{nr}^{AA} = -\frac{9}{8\pi} \frac{j^2}{t} \frac{1 + \cos(\mathbf{K} - \mathbf{K}') \mathbf{R}}{(R/a)^3} \left(\frac{T_{AA}}{\varepsilon_0} \right)^4 \quad (6.26)$$

$$E_{nr}^{AB} = \frac{27}{8\pi} \frac{j^2}{t} \frac{1 + \cos((\mathbf{K} - \mathbf{K}') \mathbf{R} - 2\theta_r)}{(R/a)^3} \left(\frac{T_{AB}}{\varepsilon_0} \right)^4 \quad (6.27)$$

Результаты (6.26,6.27) находятся в согласии с результатами теории РККИ в графене [171, 172, 174, 175, 176] (отсутствие множителя π в уравнении для $g(E, r)$ (6.25) связано с поворотом нашей системы координат на угол $\pi/2$ относительно системы координат, используемой в работах [172, 174]). Как видно из (6.25), косвенное обменное взаимодействие осциллирует с периодом атомного масштаба. Для рассмотрения реальной физической ситуации, эти короткопериодные осцилляции следует усреднить:

$$\begin{aligned}\langle E_{ex} \rangle &= \int_0^{2\pi} \frac{d\gamma}{2\pi} E_{ex}(\gamma), \\ \gamma &= (\mathbf{K} - \mathbf{K}') \mathbf{R}.\end{aligned} \quad (6.28)$$

Этот интеграл аналитически вычислить не удастся, но можно пренебречь осциллирующими слагаемыми (т.е. положить $\cos(\gamma) \rightarrow 0$) в ((6.25)). Как показывает численный расчет, ошибка, связанная с отбрасыванием этих слагаемых составляет менее 20%.

6.4.3 Результаты

В общем случае связи адатомов с обеими подрешетками имеем после усреднения (6.25) по коротковолновым осцилляциям и по полярному углу θ_p получаем [A16]:

$$\begin{aligned}
E_{ex} &= \int_{-\infty}^{E_F} \frac{dE}{\pi} \arctan \left\{ \frac{\lambda^2 E^2 f(E, r)}{[(\varepsilon_1 - E)^2 - \lambda^2][(\varepsilon_2 - E)^2 - \lambda^2]} \right\} \cdot \\
&\quad \cdot \text{sign}(E), \\
f(E, r) &= \tau_{AA}^4 J_0 \left(\frac{|E|r}{\hbar v_F} \right) N_0 \left(\frac{|E|r}{\hbar v_F} \right) + \\
&\quad + \tau_{AB}^4 J_1 \left(\frac{|E|r}{\hbar v_F} \right) N_1 \left(\frac{|E|r}{\hbar v_F} \right), \\
\tau_{AA}^4 &= \frac{16}{3t^4} (t_{1A} t_{2A}^* + t_{1B} t_{2B}^*) (t_{1A}^* t_{2A} + t_{1B}^* t_{2B}), \\
\tau_{AB}^4 &= \frac{16}{3t^4} (|t_{1A}|^2 |t_{2B}|^2 + |t_{1B}|^2 |t_{2A}|^2),
\end{aligned} \tag{6.29}$$

В дальнейшем анализе положим для простоты $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 \equiv \varepsilon_0$. В резонансном случае, $\varepsilon_0 \in (-\infty, E_F)$ энергию косвенного обмена можно оценить из (6.29) как:

$$E_{res} \sim T \sqrt{j\varepsilon_0}, \quad T = (\tau_{AA}^4 + \tau_{AB}^4)^{1/4} \tag{6.30}$$

В предельном нерезонансном случае локализованное состояние лежит гораздо выше уровня Ферми: $\varepsilon_0 \gg E_F$. Заменяя арктангенс (6.29) на свой аргумент, получаем:

$$\begin{aligned}
E_{nr} &\approx \frac{j^2}{\pi \varepsilon_0^4} \int_{-\infty}^0 dE E^2 f(E, r) = \\
&= \frac{27}{128\pi} \frac{j^2}{t} \frac{1}{(r/a)^3} \left(\frac{t}{\varepsilon_0} \right)^4 [-\tau_{AA}^4 + 3\tau_{AB}^4].
\end{aligned} \tag{6.31}$$

Выражение (6.31) согласуется с результатами теории РККИ для графена [171, 172, 174, 176], при этом энергия косвенного обмена в этом случае имеет параметрическую зависимость от туннельного и обменного параметров $E_{nr} \sim j^2 T^4$. В то время как в металлах РККИ взаимодействие как правило является ферромагнитным, т.е. способствует выстраиванию магнитных моментов в одном направлении, в графене характер взаимодействия зависит от позиции адатомов относительно элементарной ячейки графена. Из (6.31) следует, что если оба адатома связаны с одной и той же подрешеткой (AA или BB конфигурация), то косвенное обменное взаимодействие на малых расстояниях имеет ферромагнитный характер, если адатомы связаны с разными подрешетками, (AB, BA) то антиферромагнитный. Точно такой же вывод следует и из теории РККИ для графена [174]. Однако, для резонансного случая ситуация оказывается качественно другой. Выберем разумные с точки зрения реальной экспериментальной ситуации параметры, фигурирующие в выражении (6.29). Положим $j \sim 1 \div 10$ мэВ [A10],[A13], $T \sim 0.1 \div 1$ эВ [183, 164]. Эксперименты по сканирующей туннельной микроскопии графена с адатомами Со показывают, что на атоме Со имеется связанное состояние с энергией $\varepsilon_0 \sim -100$ мэВ [164]. С другой стороны, уровень Ферми в графене эффективно контролируется затвором в диапазоне $E_F \sim -300 \div 300$ мэВ [164]. На Рис. 6.7, 6.8 показаны результаты расчетов резонансного косвенного обменного взаимодействия в графене согласно выражению (6.29), энергия косвенного обмена построена как функция расстояния между адатомами для различных конфигураций (AA и AB). Расчет выполнен для следующих параметров: $j = 1$ мэВ. Туннельные параметры для AA конфигурации: $t_{1A} = t_{2A} = 1$ эВ, $t_{1B} = t_{2B} = 0$. Туннельные параметры для AB конфигурации: $t_{1A} = t_{2B} = 1$ эВ, $t_{1B} = t_{2A} = 0$. Проанализируем два случая: (i) уровень энергии связанного состояния лежит ниже дираковской точки $\varepsilon_0 = -100$ мэВ, $E_F = 0$ мэВ, (ii) уровень связанного состояния попадает в зону проводимости графена $\varepsilon_0 = 100$ мэВ, $E_F = 110$ мэВ. В обоих случаях выполнено условие резонанса за счет соответствующего поло-

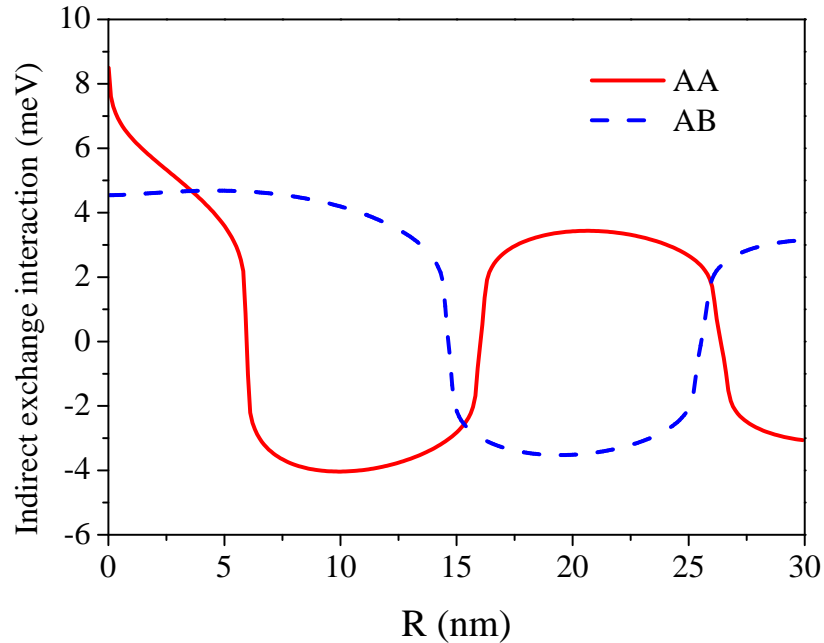


Рис. 6.7: Энергия косвенного обменного взаимодействия в зависимости от расстояния между адатомами. Энергия связанного состояния $\varepsilon_0 = -100$ мэВ, уровень Ферми $E_F = 0$ мэВ. Красная сплошная кривая - адатомы расположены в одной и той же подрешетке (AA конфигурация), синяя пунктирная кривая - адатомы расположены в различных подрешетках (AB конфигурация).

жения уровня Ферми. Результат расчета энергии косвенного обмена для случая (i) приведен на Рис. 6.7. Важное отличие от нерезонансного случая, описываемого теорией РККИ заключается в том, что косвенное обменное взаимодействие между адатомами является антиферромагнитным на малых расстояниях, причем как для AA так и для AB конфигураций. Причина качественного отличия от нерезонансного случая заключается в том, резонансное туннелирование выделяет узкую полосу энергетических уровней вблизи энергии локализованного состояния, наиболее эффективно участвующих в обмене взаимодействии с электронами внутренних оболочек адатомов, в то время как в случае РККИ в обмене сравнимым образом участвуют все свободные носители в широком диапазоне энергий. Для энергий вблизи локализованного состояния и малых расстояний между примесями оба слагаемых в (6.29) оказываются одного знака. В случае (ii) уровень энергии связанного состояния лежит в зоне проводимости графена выше дираковской точ-

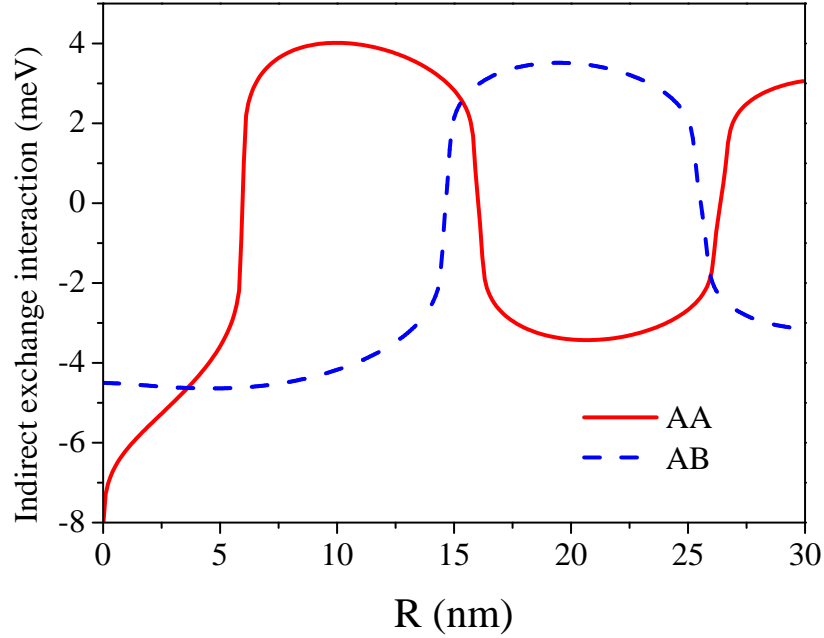


Рис. 6.8: Энергия косвенного обменного взаимодействия в зависимости от расстояния между адатомами. Энергия связанного состояния $\varepsilon_0 = 100$ мэВ, уровень Ферми $E_F = 110$ мэВ. Красная сплошная кривая - адатомы расположены в одной и той же подрешетке (AA конфигурация), синяя пунктирная кривая - адатомы расположены в различных подрешетках (AB конфигурация).

ки. Результаты расчета энергии косвенного обмена в этом случае приведены на Рис. 6.8. В этом случае как для AA, так и для AB конфигураций взаимодействие носит ферромагнитный характер на малых расстояниях. Таким образом, в резонансном случае вклады от различных конфигураций не компенсируют друг друга, поэтому определенный тип магнитного взаимодействия (в данном случае - ферромагнитное) возникает и для случайного распределения адатомов на поверхности графена, что гораздо более благоприятно с экспериментальной точки зрения. В резонансных случаях (i) и (ii) период осцилляций Λ энергии косвенного обмена с расстоянием между адатомами определяется резонансной энергией: $\Lambda \sim a \cdot t / \varepsilon_0$, в то время как в нерезонансном случае период осцилляций определяется энергией Ферми $\Lambda \sim v_F / \varepsilon_F$.

6.4.4 Модуляция магнитных свойств полем с помощью затвора

Другой важной особенностью резонансного косвенного обмена в графене является значительное усиление взаимодействия по сравнению с нерезонансным случаем. Такое же усиление возникает при резонансном косвенном обмене в гетероструктурах на основе GaAs (см. §5.4), а также в углеродных нанотрубках (§6.3). Механизм усиления во всех случаях один – при резонансном туннелировании волновая функция электронов двумерного слоя эффективно проникает в область магнитных центров, поэтому прямое обменное взаимодействие между делокализованными носителями и электронами магнитных примесей усиливается, что, в свою очередь, приводит к усилению и косвенного взаимодействия между магнитными ионами или магнитными адатомами.

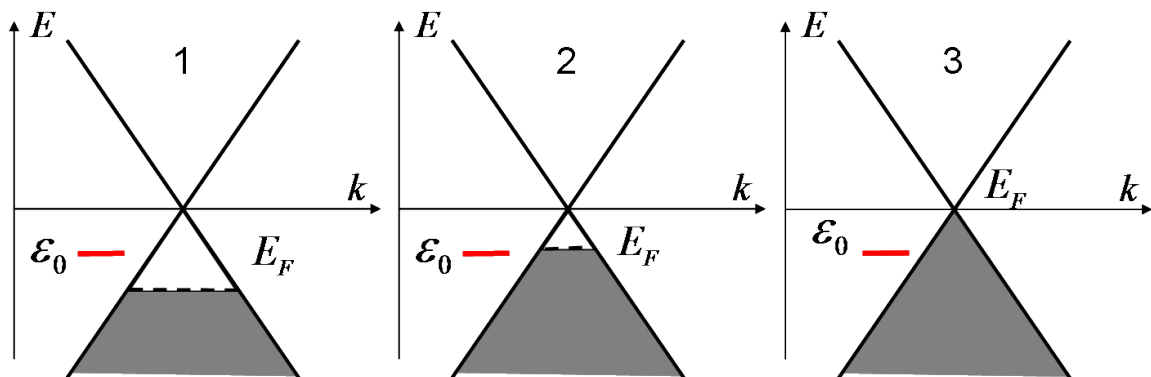


Рис. 6.9: Модуляция резонансного косвенного обмена за счет изменения положения уровня Ферми в графене. 1 - нерезонансный случай, 2 - граница условия резонанса, 3 - резонансный обмен

На основании этого эффекта можно предложить новый принцип модуляции магнитных свойств материала. Изменяя положение уровня Ферми с помощью затвора, можно контролировать условие резонансной туннельной связи, при этом величина косвенного обменного взаимодействия будет радикально изменяться. На Рис. 6.9 схематически проиллюстрированы различные положения уровня Ферми графена относительно уровня связанного состояния на адатоме, на Рис. 6.10 при-

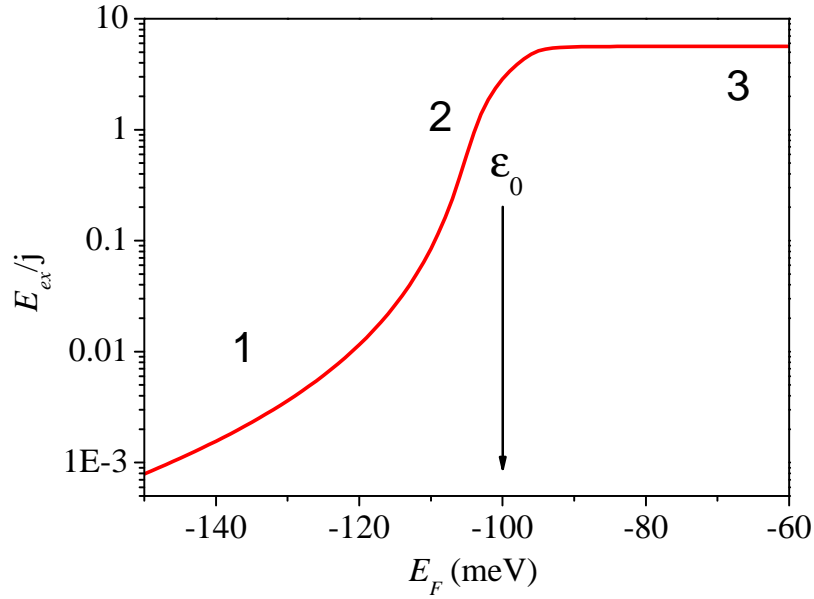


Рис. 6.10: Модуляция энергии косвенного обменного взаимодействия в зависимости от положения уровня Ферми. Энергия связанного состояния на адатоме $\varepsilon_0 = -100$ мэВ, расстояние между адатомами $R = 2$ нм, АА конфигурация.

ведены результаты расчета модуляции энергии косвенного обмена путем изменения уровня Ферми в графене внешним затвором. Расстояние между адатомами (расположенными в узлах одной подрешетки, АА конфигурация) в этом расчете полагалось $R = |\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2| = 2$ нм, энергия связанного состояния $\varepsilon_0 = -100$ мэВ. Цифрами 1,2,3 на Рис. 6.10 указаны области, соответствующие зонным диаграммам на Рис. 6.9. Как видно из Рис. 6.10, энергия косвенного обменного взаимодействия изменяется на несколько порядков при изменении положения уровня Ферми E_F на ~ 100 мэВ. Такая модуляция уровня Ферми затвором для структур на основе графена вполне достижима экспериментально. Это открывает возможности для управления магнитными свойствами графена с магнитными адатомами, в том числе для практических применений.

6.5 Краткие итоги

В главе 6 получены следующие основные результаты:

- Разработана теория резонансного косвенного обмена в графене с магнитными адатомами.
- Показано, что косвенное обменное взаимодействие между магнитными адатомами в структурах на основе графена значительно усиливается при попадании энергетического уровня локализованного состояния на адатоме в спектр заполненных состояний графена.
- Показано, что в случае резонансного косвенного обмена характер магнитного взаимодействия (антиферромагнитное или ферромагнитное) зависит только от энергии локализованного состояния на адатоме, но не зависит от расположения адатомов на поверхности графена. Таким образом, даже для случайного расположения адатомов имеется определенное магнитное взаимодействие.
- Предложен новый принцип модуляции магнитных свойств графена с магнитными адатомами. Изменение уровня Ферми носителей электрическим полем затвора приводит к значительной модуляции силы косвенного обменного взаимодействия, что открывает возможности для управления магнитными свойствами этого материала.

Заключение

В диссертации получены следующие основные результаты:

1. Построена теория туннелирования между двумерными проводящими слоями со спин-орбитальным взаимодействием. Вычислены туннельные вольт-амперные характеристики для туннелирования электронов и туннелирования дырок с учетом спин-орбитального взаимодействия Рашбы и Дрессельхауза. Установлены критерии проявления спин-орбитального взаимодействия в резонансном туннелировании между двумерными слоями. Предсказано, что эффект будет ярко выражен при туннелировании дырок в гетероструктурах на основе GaAs и SiGe. Показано, что спин-орбитальные особенности туннельного транспорта чрезвычайно чувствительны к величинам параметров Рашбы и Дрессельхауза и их отношению. Это позволяет создать новый метод экспериментального определения этих параметров взаимодействия с высокой точностью.
2. Разработана теория резонансной туннельной гибридизации примесного состояния с континуумом двумерных делокализованных состояний в квантовой яме в полупроводниковых гетероструктурах. Проанализировано влияние гибридизации на прямые оптические переходы в квантовой яме. Показано, что гибридизация приводит к провалу в спектральной плотности фотолуминесценции вблизи энергии примесного состояния. Благодаря этому явлению спиновое расщепление примесного состояния в магнитном или эффективном обменном поле приводит к циркулярной поляризации фотолуминесценции

из квантовой ямы.

3. Описан механизм резонансно-туннельной спин-зависимой рекомбинации в полупроводниковых гетероструктурах. Показано, что спин-зависимое туннелирование из квантовой ямы на примесные уровни в слое магнитных примесей приводит к накоплению спиновой поляризации в квантовой яме и циркулярной поляризации фотолюминесценции. Предложено теоретическое описание с учетом резонансной или нерезонансной туннельной связи квантовой ямы с примесным слоем и безызлучательной рекомбинации носителей в примесном слое. Расчеты качественно и количественно объясняют экспериментально наблюдаемые особенности фотолюминесценции в гетероструктурах на основе InGaAs с квантовой ямой с пространственно отделенным слоем Mn, в частности, сверхбыстрое гашение фотолюминесценции и линейный рост поляризации с характерным временем на несколько порядков меньше времени излучательной рекомбинации.
4. Предложена теория резонансного косвенного обменного взаимодействия в гетероструктурах. Теория описывает косвенное обменное взаимодействие магнитных ионов через проводящий канал, отделенный потенциальным барьером. Физический принцип взаимодействия аналогичен взаимодействию Рудермана-Киттеля-Касуя-Йосиды (РККИ), ключевое отличие предложенной теории заключается в учете резонансной гибридизации связанного состояния на примеси с проводящим каналом. Разработан теоретический подход, не использующий теорию РККИ и, поэтому, применимый для случая резонансной туннельной связи. Показано, что резонансный косвенный обмен приводит к усилению ферромагнитного взаимодействия. Теория объясняет немонотонную зависимость температуры Кюри от глубины квантовой ямы в гетероструктурах на основе InGaAs с пространственно отделенным слоем Mn.

5. Развита теория резонансного косвенного обмена в углеродных нанотрубках и графене с магнитными адатомами. Показано, что косвенное обменное взаимодействие между магнитными адатомами в структурах на основе графена значительно усиливается при попадании энергетического уровня локализованного состояния на адатоме в спектр заполненных состояний графена. Показано, что в случае резонансного косвенного обмена в графене характер магнитного взаимодействия (антиферромагнитное или ферромагнитное) на малых расстояниях зависит только от энергии локализованного состояния на адатоме, но не зависит от расположения адатомов на поверхности графена. Таким образом, даже для случайного расположения адатомов имеется определенное магнитное взаимодействие.
6. Предложен новый принцип модуляции магнитных свойств графена с магнитными адатомами. Изменение уровня Ферми носителей электрическим полем затвора приводит к значительной модуляции косвенного обменного взаимодействия, что открывает возможности для управления магнитными свойствами этого материала.

Основные результаты диссертационной работы изложены в публикациях:

- [A1] I. V. Rozhansky, N. S. Averkiev. Role of fluctuations in carrier transfer in semiconductor heterostructures // *Solid State Communications* **138**, 546 (2006).
- [A2] I. V. Rozhansky, N. S. Averkiev. Manifestation of spin-orbit interaction in tunneling between two-dimensional electron layers, *Phys. Rev. B* **77**, 115309 (2008).
- [A3] Н. С. Аверкиев, В. А. Закревский, И. В. Рожанский, Н. Т. Сударь, Инжекция дырок в органические молекулярные твердые тела // *ФТТ* **51**, 862 (2009).
- [A4] N. S. Averkiev, V. A. Zakrevskii, I. V. Rozhansky, N. T. Sudar, Peculiarities of holes injection into organic molecular solids // *Appl. Phys. Lett.* **94**, 233308 (2009).

- [A5] И. В. Рожанский, Н. С. Аверкиев, Спин-зависимая туннельная проводимость в 2D-структурах в нулевом магнитном поле // *Физика низких температур* **35**, 21 (2009).
- [A6] I. V. Rozhansky, N. S. Averkiev, Spin-dependent tunneling conductance in 2D structures in zero magnetic field // *AIP Conf. Proc.* **1199**, 1, 429 (2010).
- [A7] I. V. Rozhansky, N. S. Averkiev, E. Lahderanta, Tunneling magnetic effect in heterostructures with paramagnetic impurities // *Phys. Rev. B* **85**, 075315 (2012).
- [A8] I. V. Rozhansky, N. S. Averkiev, E. Lahderanta, Configuration interaction in delta-doped heterostructures // *Физика низких температур* **39**, 40 (2013).
- [A9] I. V. Rozhansky, N. S. Averkiev, E. Lahderanta, Fano-type coupling of a bound paramagnetic state with 2D continuum, *AIP Conf. Proc.*, 1566, 335 (2013).
- [A10] I. V. Rozhansky, I. V. Krainov, N. S. Averkiev, E. Lahderanta, Resonant exchange interaction in semiconductors // *Phys. Rev. B* **88**, 155326 (2013).
- [A11] I. V. Rozhansky, N. S. Averkiev, I. V. Krainov, E. Lahderanta, Resonant enhancement of indirect exchange interaction in semiconductor nanostructures // *phys. stat. sol.(a)* **211**, 1048 (2014).
- [A12] I. V. Rozhansky, I. V. Krainov, N. S. Averkiev, E. Lahderanta, Resonant indirect exchange in 1D semiconductor nanostructures // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* **383**, 34 (2015).
- [A13] I. V. Rozhansky, I. V. Krainov, N. S. Averkiev, B. A. Aronzon, A. B. Davydov, K. I. Kugel, V. Tripathi, E. Lahderanta, Resonant indirect exchange via spatially separated two-dimensional channel // *Appl. Phys. Lett.* **106**, 252402 (2015).

- [A14] I. V. Rozhansky, K. S. Denisov, N. S. Averkiev, I. A. Akimov, E. Lahderanta, Spin-dependent tunneling in semiconductor heterostructures with a magnetic layer // Phys. Rev. B **92**, 125428 (2015).
- [A15] Ya. V. Terent'ev, S. N. Danilov, H. Plank, J. Loher, D. Schuh, D. Bougeard, D. Weiss, M. V. Durnev, S. A. Tarasenko, I. V. Rozhansky, S. V. Ivanov, D. R. Yakovlev, S. D. Ganichev, Magneto-optical study of Zeeman effect in Mn modulation-doped InAs/InGaAs/InAlAs quantum well structures // J. Appl. Phys. **118**, 113906 (2015).
- [A16] I. V. Krainov, I. V. Rozhansky, N. S. Averkiev, E. Lahderanta, Indirect exchange interaction between magnetic adatoms in graphene // Phys. Rev. B **92**, 155432 (2015).
- [A17] L. N. Oveshnikov, V. A. Kulbachinskii, A. B. Davydov, B. A. Aronzon, I. V. Rozhansky, N. S. Averkiev, K. I. Kugel, V. Tripathi, Berry phase mechanism of the anomalous Hall effect in a disordered two-dimensional magnetic semiconductor structure // Scientific Reports **5**, 17158 (2015).
- [A18] I. V. Rozhansky, N. S. Averkiev, E. Lahderanta, Resonant tunneling between two-dimensional layers accounting for spin-orbit interaction // Phys. Rev. B **93**, 195405 (2016).
- [A19] К. С. Денисов, И. В. Рожанский, Н. С. Аверкиев, Е. Lahderanta, Спин-зависимое туннелирование в гетероструктурах с магнитным слоем // ФТП **50**, 1304 (2016).

Я благодарен своим друзьям и коллегам, чьи внимание, поддержка и советы помогли мне в работе над диссертацией. Я глубоко признателен Н. С. Аверкиеву за неоценимую научную и организационную поддержку и воодушевляющий пример гармонии теоретической физики и теплоты человеческого общения. Выражаю искреннюю глубокую благодарность своим коллегам и соавторам И. В. Крайнову, К. Д. Денисову за плодотворную совместную работу, энтузиазм, интересные научные дискуссии и дружескую атмосферу. Хочу выразить глубокую благодарность И. Н. Ясиевич за поддержку.

Я особенно благодарен коллегам Б. А. Аронзону, И. Акимову, П. Альтману, А. Д. Буравлеву, В. В. Валькову, Р. Винклеру, М. М. Глазову, Л. Е. Голубу, Т. Дитлу, М. В. Дорохину, С. В. Зайцеву, В. И. Козубу, В. Л. Кореневу, В. Д. Кулаковскому, А. М. Монахову, В. И. Окулову, Х. Оно, В. Ф. Сапеге, С. А. Тарасенко, Дж. Эйзенштейну за плодотворные научные обсуждения. Выражаю искреннюю благодарность Э. Лахдеранта за многолетнее сотрудничество, поддержание плодотворного научного процесса и теплые дружеские отношения.

Выражаю глубокую признательность участникам Низкоразмерного и Чайного семинаров ФТИ. Обсуждение на этих семинарах работ, вошедших в диссертацию, принесло мне большую пользу.

Я благодарен моему папе Владимиру Александровичу Рожанскому за приверженность научным ценностям и отношение к физике и глубоко признателен моим родителями Ирине Феликсовне и Владимиру Александровичу Рожанским, моей жене Маше Лифшиц и детям Ане, Мише и Лёне Рожанским за любовь, терпение и поддержку.

Литература

- [1] *Wolf E.* Nanophysics and Nanotechnology: An Introduction to Modern Concepts in Nanoscience, 3rd Edition. — Wiley-VCH, 2015.
- [2] *Grundmann M.* The Physics of Semiconductors. — Springer, 2010.
- [3] *Yu P. Y., Cardona M.* Fundamentals of semiconductors. — Springer, 2010.
- [4] *Davies J.* The Physics of Low-dimensional Semiconductors: An Introduction. — Cambridge University Press, 2009.
- [5] *Ivchenko E. L., Pikus G. E.* Superlattices and other heterostructures. — Berlin: Springer, 1995.
- [6] Silicon quantum electronics / F. A. Zwanenburg, A. S. Dzurak, A. Morello et al. // *Rev. Mod. Phys.* — 2013. — Vol. 85. — Pp. 961–1019.
- [7] *Rossi F.* Theory of Semiconductor Quantum Devices. — Springer, 2011.
- [8] *Fox M.* Quantum Optics: An Introduction. — Oxford University Press, 2010.
- [9] *Ivchenko E. L.* Optical Spectroscopy of Semiconductor Nanostructures. — Alpha Science, 2005.
- [10] *Harrison P., Valavanis A.* Quantum Wells, Wires and Dots: Theoretical and Computational Physics of Semiconductor Nanostructures. — Wiley, 2016.
- [11] Оптические свойства наноструктур / Л. Е. Воробьев, Е. Л. Ивченко, Д. А. Фирсов, В. А. Шалыгин. — Санкт-Петербург: Наука, 2001.

- [12] *Žutić I., Fabian J., Das Sarma S.* Spintronics: Fundamentals and applications // *Rev. Mod. Phys.* — 2004. — Vol. 76. — Pp. 323–410.
- [13] *Awschalom D., Flatte M.* Challenges for semiconductor spintronics // *Nat Phys.* — 2007. — Vol. 3. — P. 153.
- [14] *M.I. Dyakonov (Ed.).* Spin Physics in Semiconductors. — Springer, 2008.
- [15] *Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц.* Квантовая механика (нерелятивистская теория). — Москва: Наука, 1989.
- [16] *Sze S., Ng K.* Physics of Semiconductor Devices (3rd Edition). — Willey, 2006.
- [17] *Esaki L.* New phenomenon in narrow germanium $p-n$ junctions // *Phys. Rev.* — 1958. — Vol. 109. — Pp. 603–604.
- [18] *Р.Ф.Казаринов, Р.А. Сурис.* О возможности усиления электромагнитных волн в полупроводниках со сверхрешеткой // *ФТП.* — 1971. — Vol. 5. — P. 797.
- [19] Quantum cascade laser / J. Faist, F. Capasso, D. L. Sivco et al. // *Science.* — 1994. — Vol. 264, no. 5158. — Pp. 553–556.
- [20] *Micheloni R., Marelli A., Eshghi K.* Inside Solid State Drives (SSDs). — Springer, 2013.
- [21] *Julliere M.* Tunneling between ferromagnetic films // *Physics Letters A.* — 1975. — Vol. 54, no. 3. — Pp. 225 – 226.
- [22] *Tsymbal E., Zutic I.* Handbook of Spin Transport and Magnetism. — Chapman and Hall/CRC, 2011.
- [23] *Josephson B.* Possible new effects in superconductive tunnelling // *Physics Letters.* — 1962. — Vol. 1, no. 7. — Pp. 251 – 253.
- [24] *J. Clarke, A. I. Braginski (Eds.).* The SQUID Handbook. — Willey-Vch, 2004.

- [25] *Kastner M. A.* The single-electron transistor // *Rev. Mod. Phys.* — 1992. — Vol. 64. — Pp. 849–858.
- [26] *Fowler R. H., Nordheim L.* Electron emission in intense electric fields // *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences.* — 1928. — Vol. 119, no. 781. — Pp. 173–181.
- [27] *Griffiths J.* Introduction to Quantum Mechanics, 2nd Edition. — Pearson Education, 2005.
- [28] *Mizuta H., Tanoue T.* The Physics and Applications of Resonant Tunneling Diodes. — Cambridge University Press, 2006.
- [29] Spin-dependent tunneling through a symmetric semiconductor barrier / V. I. Perel', S. A. Tarasenko, I. N. Yassievich et al. // *Phys. Rev. B.* — 2003. — Vol. 67. — P. 201304.
- [30] Spin-dependent resonant tunneling in symmetrical double-barrier structures / M. M. Glazov, P. S. Alekseev, M. A. Odnoblyudov et al. // *Phys. Rev. B.* — 2005. — Vol. 71. — P. 155313.
- [31] *Bardeen J.* Tunnelling from a many-particle point of view // *Phys. Rev. Lett.* — 1961. — Vol. 6. — Pp. 57–59.
- [32] *Gottlieb A. D., Wesoloski L.* Bardeen's tunnelling theory as applied to scanning tunnelling microscopy: a technical guide to the traditional interpretation // *Nanotechnology.* — 2006. — Vol. 17, no. 8. — P. R57.
- [33] *Duke C. B.* Tunneling in Solids. — Press, New York, 1969.
- [34] *Voigtlander B.* Scanning Probe Microscopy Atomic Force Microscopy and Scanning Tunneling Microscopy. — Springer, 2015.
- [35] *Cohen M. H., Falicov L. M., Phillips J. C.* Superconductive tunneling // *Phys. Rev. Lett.* — 1962. — Vol. 8. — Pp. 316–318.

- [36] *Scalapino D. J., Marcus S. M.* Theory of inelastic electron-molecule interactions in tunnel junctions // *Phys. Rev. Lett.* — 1967. — Vol. 18. — Pp. 459–461.
- [37] *П. И. Арсеев, Н. С. Маслова.* Взаимодействие электронов с колебательными модами при туннелировании через одиночные молекулы // *Успехи физических наук.* — 2010. — Vol. 180, no. 11. — Pp. 1197–1216.
- [38] *Ryndyk D.* Theory of Quantum Transport at Nanoscale. — Springer, Switzerland, 2016.
- [39] *Mahan G. D.* Many-Particle Physics. — Plenum, New York, 1981.
- [40] *H. Bruus, K. Flensberg.* Many-Body Quantum Theory in Condensed Matter Physics. — Oxford University Press, 2004.
- [41] *Forrest S. R.* The path to ubiquitous and low-cost organic electronic appliances on plastic // *Nature.* — 2004. — Vol. 428. — P. 911.
- [42] *А. Чайновт.* Внутренняя автоэлектронная эмиссия // *УФН.* — 1961. — Т. 75. — С. 169.
- [43] *Yan P., Zhou Y., Yoshimura N.* DC conduction in polyethylene films under high electric field after annealing // *Jpn. J. Appl. Phys., Part 1.* — 2000. — Vol. 39. — P. 3492.
- [44] *Liu D., Kao K. C.* High-field hole injection, conduction, and breakdown in polyethylene films fabricated by plasma polymerization // *J. Appl. Phys.* — 1991. — Vol. 69. — P. 2489.
- [45] *Tu N. R., Kao K. C.* High-field electrical conduction in polyimide films // *J. Appl. Phys.* — 1999. — Vol. 85. — P. 7267.
- [46] Current-voltage behavior in hole-only single-carrier devices with self-assembling dipole molecules on indium tin oxide anodes / C. Ganzorig, M. Sakomura, K. Ueda, M. Fujihira // *Appl. Phys. Lett.* — 2006. — Vol. 89. — P. 263501.

- [47] *Abkowitz M. A., Mizes H. A., Facci J. S.* Emission limited injection by thermally assisted tunneling into a trap-free transport polymer // *Appl. Phys. Lett.* — 1995. — Vol. 66. — P. 1288.
- [48] *Bässler H.* Charge transport in disordered organic photoconductors a monte carlo simulation study // *Phys. Stat. Sol. (b)*. — 1993. — Vol. 175. — P. 15.
- [49] *Arkhipov V. I., Wolf U., Bässler H.* Current injection from a metal to a disordered hopping system. ii. comparison between analytic theory and simulation // *Phys. Rev. B*. — 1999. — Vol. 59. — P. 7514.
- [50] *В. А. Закревский, Н. Т. Сударь.* Электрическое разрушение тонких полимерных пленок // *ФТТ*. — 2005. — Vol. 47. — P. 931.
- [51] Thickness dependence of space charge limited current and injection limited current in organic molecular semiconductors / R. Agrawal, P. Kumar, S. Ghosh, A. K. Mahapatro // *Appl. Phys. Lett.* — 2008. — Vol. 93. — P. 073311.
- [52] *В. А. Закревский, Н. Т. Сударь.* Инжекция дырок в полимеры из металлических электродов в сильных электрических полях // *ФТТ*. — 1992. — Vol. 34. — P. 3228.
- [53] *Ouisse T.* Tunnelling process between a semiconductor or a metal and a polymer // *Eur. Phys. J. Ser. B*. — 2001. — Vol. 22. — P. 415.
- [54] Alignment of energy levels at the alq3 lamno interface for organic spintronic devices / Y. Q. Zhan, I. Bergenti, L. E. Hueso et al. // *Phys. Rev. B*. — 2007. — Vol. 76. — P. 045406.
- [55] *А. Л. Суворов, В. В. Требуховский.* Масс-анализ в автоионной микроскопии // *УФН*. — 1972. — Vol. 107. — P. 657.

- [56] Temperature dependence of the charge injection in poly-dialkoxy-p-phenylene vinylene / T. van Woudenberg, P. W. M. Blom, M. C. J. M. Vissenberg, J. N. Huiberts // *Appl. Phys. Let.* — 2001. — Vol. 79. — P. 1697.
- [57] High-efficiency polymer light-emitting diodes based on poly[2-methoxy-5-(2-ethylhexyloxy)-1,4-phenylene vinylene] with plasma-polymerized CHF₃-modified indium tin oxide as an anode / C.-C. Hsiao, C.-H. Chang, T.-H. Jen et al. // *Appl. Phys. Let.* — 2006. — Vol. 88. — P. 033512.
- [58] *Fano U.* Effects of configuration interaction on intensities and phase shifts // *Phys. Rev.* — 1961. — Vol. 124, no. 6. — Pp. 1866–1878.
- [59] *Anderson P. W.* Localized magnetic states in metals // *Phys. Rev.* — 1961. — Vol. 124. — P. 41.
- [60] *Mueller E.* Scattering tutorial // <http://people.ccmr.cornell.edu/emueller/scatter.pdf>. — 2002.
- [61] Lifetime of two-dimensional electrons measured by tunneling spectroscopy / S. Q. Murphy, J. P. Eisenstein, L. N. Pfeiffer, K. W. West // *Phys. Rev. B.* — 1995. — Vol. 52. — P. 14825.
- [62] Resonant tunnelling and negative differential conductance in graphene transistors / L. Britnell, R. V. Gorbachev, A. K. Geim et al. // *Nat Commun.* — 2013. — Vol. 4. — P. 1794.
- [63] *Zheng L., MacDonald A. H.* Tunneling conductance between parallel two-dimensional electron systems // *Phys. Rev. B.* — 1993. — Vol. 47. — P. 10619.
- [64] *Vasko F. T., Balev O. G., Studart N.* Inhomogeneous broadening of tunneling conductance in double quantum wells // *Phys. Rev. B.* — 2000. — Vol. 62. — P. 12940.

- [65] Tunneling between parallel two-dimensional electron gases / N. Turner, J. T. Nicholls, E. H. Linfield et al. // *Phys. Rev. B.* — 1996. — Vol. 54. — P. 10614.
- [66] Туннелирование электронов между двумерными электронными системами в гетероструктуре с одиночным легированным барьером / В.Г. Попов, Ю.В. Дубровский, Ю.Н. Ханин et al. // *ФТП.* — 1998. — Vol. 32. — P. 602.
- [67] *В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский.* Квантовая электродинамика. — Москва: Физматлит, 2002.
- [68] *Konishi K., Paffuti G.* Quantum Mechanics. A New introduction. — Oxford University Press, 2009.
- [69] *Winkler R.* Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems. — Springer Berlin Heidelberg, 2003.
- [70] *Ю. А. Бычков, Э. И. Раиба* // *Письма в ЖЭТФ.* — 1984. — Vol. 39. — P. 66.
- [71] *Ф. Т. Васько* // *Письма в ЖЭТФ.* — 1979. — Vol. 30. — P. 574.
- [72] *Dresselhaus G.* Spin-orbit coupling effects in zinc blende structures // *Phys. Rev.* — 1955. — Vol. 100. — Pp. 580–586.
- [73] *М.И. Дьяконов, В.Ю. Качоровский* // *ФТП.* — 1986. — Vol. 20. — P. 178.
- [74] Direct mapping of the formation of a persistent spin helix / M. P. Walser, C. Reichl, W. Wegscheider, G. Salis // *Nat. Phys.* — 2012. — Vol. 8. — P. 757.
- [75] Spin-relaxation anisotropy in asymmetrical (001) $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ quantum wells from Hanle-effect measurements: Relative strengths of Rashba and Dresselhaus spin-orbit coupling / N. S. Averkiev, L. E. Golub, A. S. Gurevich et al. // *Phys. Rev. B.* — 2006. — Vol. 74. — P. 033305.

- [76] Emergence of the persistent spin helix in semiconductor quantum wells / J. D. Koralek, C. P. Weber, J. Orenstein et al. // *Nature*. — 2009. — Vol. 458. — P. 610.
- [77] Quantum lifetime of two-dimensional holes / J. Eisenstein, D. Syphers, L. Pfeiffer, K. West // *Solid State Communications*. — 2007. — Vol. 143. — P. 365.
- [78] *Raichev O. E., Debray P.* Tunneling spectroscopy of spin-split states in quantum wells // *Phys. Rev. B*. — 2003. — Vol. 67. — P. 155304.
- [79] *Zyuzin V. A., Mishchenko E. G., Raikh M. E.* Tunneling between two-dimensional electron layers with correlated disorder: Anomalous sensitivity to spin-orbit coupling // *Phys. Rev. B*. — 2006. — Vol. 74. — P. 205322.
- [80] *Datta S., Das B.* Electronic analog of the electrooptic modulator // *Applied Physics Letters*. — 1990. — Vol. 56, no. 7. — P. 665.
- [81] *Ж. А. Девизорова, В. А. Волков.* Спиновое расщепление 2D-состояний в зоне проводимости несимметричных гетероструктур: вклад атомарно резкого интерфейса // *Письма в ЖЭТФ*. — 2013. — Т. 98. — С. 110.
- [82] *Habib B., Shayegan M., Winkler R.* Spin-orbit interaction and transport in GaAs two-dimensional holes // *Semiconductor Science and Technology*. — 2009. — Vol. 24, no. 6. — P. 064002.
- [83] Cubic Rashba spin-orbit interaction of a two-dimensional hole gas in a strained-Ge/SiGe quantum well / R. Moriya, K. Sawano, Y. Hoshi et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2014. — Vol. 113. — P. 086601.
- [84] *Durnev M. V., Glazov M. M., Ivchenko E. L.* Spin-orbit splitting of valence subbands in semiconductor nanostructures // *Phys. Rev. B*. — 2014. — Vol. 89. — P. 075430.

- [85] П. С. Алексеев. Интерфейсный анизотропный вклад в спин-орбитальное взаимодействие в квантовых ямах // *Письма в ЖЭТФ*. — 2013. — Т. 98. — С. 92.
- [86] Спиновое расщепление 2D-состояний в зоне проводимости несимметричных гетероструктур: вклад атомарно резкого интерфейса / Ж. А. Девизорова and А. В. Щепетильников, Ю. А. Нефёдов, В. А. Волков, И. В. Кукушкин // *Письма в ЖЭТФ*. — 2014. — Т. 100. — С. 111.
- [87] *Giuliani G. F., Quinn J. J.* Lifetime of a quasiparticle in a two-dimensional electron gas // *Phys. Rev. B*. — 1982. — Vol. 26. — Pp. 4421–4428.
- [88] Anomalous rashba spin splitting in two-dimensional hole systems / R. Winkler, H. Noh, E. Tutuc, M. Shayegan // *Phys. Rev. B*. — 2002. — Vol. 65. — P. 155303.
- [89] *Winkler R.* Rashba spin splitting in two-dimensional electron and hole systems // *Phys. Rev. B*. — 2000. — Vol. 62. — Pp. 4245–4248.
- [90] Characterization of spin-orbit interactions of gas heavy holes using a quantum point contact / F. Nichele, S. Chesi, S. Hennel et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2014. — Vol. 113. — P. 046801.
- [91] Direct determination of spin-orbit interaction coefficients and realization of the persistent spin helix symmetry / A. Sasaki, S. Nonaka, Y. Kunihashi et al. // *Nat Nano*. — 2014. — Vol. 9, no. 9. — P. 703.
- [92] Narrow heavy-hole cyclotron resonances split by the cubic Rashba spin-orbit interaction in strained germanium quantum wells / M. Failla, M. Myronov, C. Morrison et al. // *Phys. Rev. B*. — 2015. — Vol. 92. — P. 045303.
- [93] Примесные резонансные состояния в полупроводниках Обзор / В.Я. Алёшкин, Л.В. Гавриленко, М.А. Одноблюдов, И.Н. Ясиевич // *ФТП*. — 2008. — Vol. 42. — P. 899.

- [94] *Miroshnichenko A. E., Flach S., Kivshar Y. S.* Fano resonances in nanoscale structures // *Rev. Mod. Phys.* — 2010. — Vol. 82. — Pp. 2257–2298.
- [95] Излучение и фотопроводимость в квантовых ямах GaAs/AlGaAs n-типа в терагерцовой области спектра: роль резонансных состояний / Д.А. Фирсов, В.А. Шалыгин, В.Ю. Паневин et al. // *ФТП.* — 2010. — Vol. 44. — P. 1443.
- [96] Resonant states induced by impurities in heterostructures / A. Blom, M. A. Odnoblyudov, I. N. Yassievich, K. A. Chao // *Phys. Rev. B.* — 2002. — Vol. 65. — P. 155302.
- [97] Anomalous low-temperature contribution to the heat capacity from hybridized electronic states on transition element impurities / V. I. Okulov, A. T. Lonchakov, T. E. Govorkova et al. // *Low Temperature Physics.* — 2011. — Vol. 37, no. 3. — Pp. 220–225.
- [98] Emission properties of InGaAs/GaAs heterostructures with delta Mn-doped barrier / M. V. Dorokhin, Y. A. Danilov, P. B. Demina et al. // *Journal of Physics D: Applied Physics.* — 2008. — Vol. 41, no. 24. — P. 245110.
- [99] Влияние параметров дельта Mn-легирования GaAs-барьера на циркулярно поляризованную люминесценцию гетероструктур GaAs/InGaAs / М. В. Дорохин, С. В. Зайцев, А. С. Бричкин и др. // *ФТТ.* — 2010. — Т. 52. — С. 2147.
- [100] Hybrid ferromagnetic/semiconductor heterostructures for spintronics / N. Samarth, S. Chun, K. Ku et al. // *Solid State Communications.* — 2003. — Vol. 127, no. 2. — Pp. 173 – 179. — Quantum Phases at the Nanoscale.
- [101] Long-range p-d exchange interaction in a ferromagnet-semiconductor hybrid structure / V. L. Korenev, M. Salewski, I. A. Akimov et al. // *Nat. Phys.* — 2016. — Vol. 12. — P. 85.

- [102] (Ga,Mn)As: A new diluted magnetic semiconductor based on GaAs / H. Ohno, A. Shen, F. Matsukura et al. // *Applied Physics Letters*. — 1996. — Vol. 69, no. 3. — P. 363.
- [103] Theory of ferromagnetic (III, Mn) V semiconductors / T. Jungwirth, J. Sinova, J. Masek et al. // *Rev. Mod. Phys.* — 2006. — Vol. 78. — P. 809.
- [104] *Dietl T., Ohno H.* Dilute ferromagnetic semiconductors: Physics and spintronic structures // *Rev. Mod. Phys.* — 2014. — Vol. 86. — Pp. 187–251.
- [105] *Fleurov V., Kikoin K., Zunger A.* On the nature of the magnetism-promoting states in dilute magnetic semiconductor and oxide thin films // *Journal of Nanoelectronics and Optoelectronics*. — 2013. — Vol. 8, no. 5. — Pp. 466–471.
- [106] Ферромагнитное воздействие дельта-Mn слоя в GaAs барьере на спиновую поляризацию носителей в InGaAs/GaAs квантовой яме / С. В. Зайцев, М. В. Дорохин, А. С. Бричкин и др. // *Письма в ЖЭТФ*. — 2009. — Т. 90. — С. 730.
- [107] *А. И. Дмитриев, Р. Б. Моргунов, С. В. Зайцев.* Электронный спиновый резонанс в гетероструктурах InGaAs/GaAs с дельта-слоем марганца // *ЖЭТФ*. — 2011. — Т. 140. — С. 709.
- [108] *Zaitsev S. V., Zvonkov B. N.* Circularly polarized photoluminescence of insulating InGaAs/GaAs heterostructures with a ferromagnetic Mn delta-layer in the barrier // *physica status solidi (b)*. — 2011. — Vol. 248, no. 6. — Pp. 1526–1531.
- [109] *С. В. Зайцев.* Магнитооптика гетероструктур с квантовой ямой InGaAs/GaAs и ферромагнитным дельта-слоем Mn // *Физика низких температур*. — 2012. — Т. 38. — С. 513.
- [110] *Lucovsky G.* On the photoionization of deep impurity centers in semiconductors. // *Sol.St.Comm.* — 1965. — Vol. 3. — Pp. 299–302.

- [111] *А. И. Ансельм.* Введение в теорию полупроводников. — Лань, 2008.
- [112] *Н. С. Аверкиев, С. Ю. Ильинский.* Спиновое упорядочение носителей заряда, локализованных на двух глубоких центрах в кубических полупроводниках // *ФТТ.* — 1994. — Vol. 36. — P. 503.
- [113] Electronic structure of the neutral manganese acceptor in gallium arsenide / J. Schneider, U. Kaufmann, W. Wilkening et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 1987. — Vol. 59. — Pp. 240–243.
- [114] Dynamic spin polarization by orientation-dependent separation in a ferromagnet-semiconductor hybrid / V. L. Korenev, I. A. Akimov, S. V. Zaitsev et al. // *Nat. Commun.* — 2012. — Vol. 3. — P. 959.
- [115] Ferromagnetism of low-dimensional Mn-doped III-V semiconductor structures in the vicinity of the insulator-metal transition / B. A. Aronzon, M. A. Pankov, V. V. Rylkov et al. // *J. Appl. Phys.* — 2010. — Vol. 107, no. 2. — P. 023905.
- [116] Curie temperature versus hole concentration in field-effect structures of $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x\text{As}$ / Y. Nishitani, D. Chiba, M. Endo et al. // *Phys. Rev. B.* — 2010. — Vol. 81. — P. 045208.
- [117] Optical orientation and spin-dependent recombination in GaAs alloys under continuous-wave pumping / E. L. Ivchenko, V. K. Kalevich, A. Y. Shiryayev et al. // *Journal of Physics: Condensed Matter.* — 2010. — Vol. 22, no. 46. — P. 465804.
- [118] *Ivchenko E. L., Bakaleinikov L. A., Kalevich V. K.* Spin-dependent recombination and hyperfine interaction at deep defects // *Phys. Rev. B.* — 2015. — Vol. 91. — P. 205202.

- [119] Спин-зависимая рекомбинация в твердых растворах GaAs_{1-x}N_x в наклонном магнитном поле / Е.Л.Ивченко, Л.А.Бакалейников, М.М.Афанасьев, В.К.Калевич // *ФТП*. — 2016. — Vol. 58. — P. 1490.
- [120] Orientation of electron spins in hybrid ferromagnet–semiconductor nanostructures / I. Akimov, V. L. Korenev, V. F. Sapega et al. // *physica status solidi (b)*. — 2014. — Vol. 251. — P. 1663.
- [121] Spin-dependent phenomena and device concepts explored in (ga,mn)as / T. Jungwirth, J. Wunderlich, V. Novák et al. // *Rev. Mod. Phys.* — 2014. — Vol. 86. — Pp. 855–896.
- [122] Carrier dynamics in low-temperature grown GaAs studied by terahertz emission spectroscopy / H. Nemeč, A. Pashkin, P. Kuzel et al. // *J. Appl. Phys.* — 2001. — Vol. 90. — P. 1303.
- [123] *Mahadevan P., Zunger A.* Ferromagnetism in Mn-doped GaAs due to substitutional-interstitial complexes // *Phys. Rev. B*. — 2003. — Vol. 68. — P. 075202.
- [124] *Mattis D. C.* The Theory of Magnetism I. — Springer, Switzerland, 1981.
- [125] *Methfessel S., Mattis D. C.* Magnetic Semiconductors. — Springer, Switzerland, 1968.
- [126] *Blundell S. J.* Magnetism in Condensed Matter. — Oxford University Press, 2012.
- [127] *Coe J. M. D.* Magnetism and Magnetic Materials. — Cambridge University Press, 2010.
- [128] *Nolting W., Ramakanth A.* Quantum Theory of Magnetism. — Springer, 2010.
- [129] *Anderson P. W.* A Career in Theoretical Physics. — Москва: World Scientific, 1994.

- [130] *Stohr J., Siegmann H. C.* Magnetism: From Fundamentals to Nanoscale Dynamics. — Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2006.
- [131] *Ruderman M. A., Kittel C.* Indirect exchange coupling of nuclear magnetic moments by conduction electrons // *Phys. Rev.* — 1954. — Vol. 96. — Pp. 99–102.
- [132] *Kasuya T.* Electrical resistance of ferromagnetic metals // *Prog. Theor. Phys.* — 1956. — Vol. 16. — P. 45.
- [133] *Yosida K.* Magnetic properties of Cu-Mn alloys // *Phys. Rev.* — 1957. — Vol. 106. — P. 893.
- [134] *Ч. Куммель.* Квантовая теория твердых тел. — Москва: Наука, 1967.
- [135] *Aristov D. N.* Indirect RKKY interaction in any dimensionality // *Phys. Rev. B.* — 1997. — Vol. 55. — Pp. 8064–8066.
- [136] *Ohno H.* Properties of ferromagnetic iii–v semiconductors // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials.* — 1999. — Vol. 200, no. 1–3. — Pp. 110 – 129.
- [137] Magnetism in a Mn modulation-doped InAs/InGaAs heterostructure with a two-dimensional hole system / B. Rupprecht, W. Krenner, U. Wurstbauer et al. // *J. Appl. Phys.* — 2010. — Vol. 107. — P. 093711.
- [138] Effects of a nearby mn delta layer on the optical properties of an ingaas/gaas quantum well / M. A. G. Balanta, M. J. S. P. Brasil, F. Iikawa et al. // *Journal of Applied Physics.* — 2014. — Vol. 116, no. 20. — P. 203501.
- [139] Свойства квантовых ям InGaAs/GaAs с дельта-Mn-легированным слоем в GaAs / Б. А. Аронзон, А. Б. Грановский, А. Б. Давыдов и др. // *ФТТ.* — 2007. — Т. 49. — С. 165.

- [140] Quantum, normal and anomalous Hall effect in 2d ferromagnetic structures: GaAs/InGaAs/GaAs quantum well with remote Mn delta-layer / B. Aronzon, A. Davydov, M. Goiran et al. // *Journal of Physics: Conference Series*. — 2013. — Vol. 456. — P. 012001.
- [141] *Erickson R. P., Hathaway K. B., Cullen J. R.* Mechanism for non-Heisenberg exchange coupling between ferromagnetic layers // *Phys. Rev. B*. — 1993. — Vol. 47. — Pp. 2626–2635.
- [142] *Stiles M. D.* Exchange coupling in magnetic heterostructures // *Phys. Rev. B*. — 1993. — Vol. 48. — Pp. 7238–7258.
- [143] *Ab initio* calculations of the exchange coupling of Fe and Co monolayers in Cu / P. Lang, L. Nordström, R. Zeller, P. H. Dederichs // *Phys. Rev. Lett.* — 1993. — Vol. 71. — Pp. 1927–1930.
- [144] *Jayaprakash C., Krishna-murthy H. R., Wilkins J. W.* Two-impurity kondo problem // *Phys. Rev. Lett.* — 1981. — Vol. 47. — Pp. 737–740.
- [145] *Hewson A.* The Kondo Problem to Heavy Fermions. — Cambridge University Press, 1993.
- [146] *Schwabe A., Titvinidze I., Potthoff M.* Inverse indirect magnetic exchange // *Phys. Rev. B*. — 2013. — Vol. 88. — P. 121107.
- [147] *Nyeo S.-L.* Regularization methods for delta-function potential in two-dimensional quantum mechanics // *American Journal of Physics*. — 2000. — Vol. 68, no. 6. — Pp. 571–575.
- [148] *Cavalcanti R. M.* Exact Green's functions for delta-function potentials and renormalization in quantum mechanics // *Rev. Bras. Ens. Fis.* — 1999. — Vol. 21. — P. 336.

- [149] Charge inhomogeneities and transport in semiconductor heterostructures with a Mn delta-layer / V. Tripathi, K. Dhochak, B. A. Aronzon et al. // *Phys. Rev. B*. — 2011. — Vol. 84. — P. 075305.
- [150] *Mermin N. D., Wagner H.* Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic heisenberg models // *Phys. Rev. Lett.* — 1966. — Vol. 17. — Pp. 1133–1136.
- [151] Curie point singularity in the temperature derivative of resistivity in (ga,mn)as / V. Novák, K. Olejník, J. Wunderlich et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2008. — Vol. 101. — P. 077201.
- [152] Determining curie temperatures in dilute ferromagnetic semiconductors: High curie temperature (ga,mn)as / M. Wang, R. A. Marshall, K. W. Edmonds et al. // *Applied Physics Letters*. — 2014. — Vol. 104, no. 13. — P. 132406.
- [153] Noise studies of magnetization dynamics in dilute magnetic semiconductor heterostructures / V. Tripathi, K. Dhochak, B. A. Aronzon et al. // *Phys. Rev. B*. — 2012. — Vol. 85. — P. 214401.
- [154] Structural and transport properties of gaas/delta-mn/gaas/inxgal-xas/gaas quantum wells / B. A. Aronzon, M. V. Kovalchuk, E. M. Pashaev et al. // *Journal of Physics: Condensed Matter*. — 2008. — Vol. 20. — P. 145207.
- [155] Ferromagnetic gaas structures with single mn delta-layer fabricated using laser deposition / Y. A. Danilov, O. V. Vikhrova, A. V. Kudrin, B. N. Zvonkov // *J. Nanosci. Nanotechn.* — 2012. — Vol. 12. — P. 5122.
- [156] Controlling the curie temperature in (ga,mn)as through location of the fermi level within the impurity band / M. Dobrowolska, K. Tivakornsasithorn, X. Liu et al. // *Nature Materials*. — 2012. — Vol. 11. — Pp. 444–449.

- [157] High curie temperatures at low compensation in the ferromagnetic semiconductor (ga,mn)as / M. Wang, K. W. Edmonds, B. L. Gallagher et al. // *Phys. Rev. B.* — 2013. — Vol. 87. — P. 121301.
- [158] Antisite effect on hole-mediated ferromagnetism in (ga,mn)as / R. C. Myers, B. L. Sheu, A. W. Jackson et al. // *Phys. Rev. B.* — 2006. — Vol. 74. — P. 155203.
- [159] *Myers R. C., Gossard A. C., Awschalom D. D.* Tunable spin polarization in iii-v quantum wells with a ferromagnetic barrier // *Phys. Rev. B.* — 2004. — Vol. 69. — P. 161305.
- [160] *Е. З. Мейлихов, Р. М. Фарзетдинова.* Ферромагнетизм полупроводниковых структур с косвенным взаимодействием магнитных примесей через квазидвумерный канал проводимост // *Письма в ЖЭТФ.* — 2008. — Т. 87. — С. 568.
- [161] *Yazyev O. V.* Emergence of magnetism in graphene materials and nanostructures // *Reports on Progress in Physics.* — 2010. — Vol. 73, no. 5. — P. 056501.
- [162] *Katsnelson M. I.* Graphene: Carbon in Two Dimensions. — Cambridge University Press, 2012.
- [163] *Power S. R., Ferreira M. S.* Indirect exchange and ruderman–kittel–kasuya–yosida (rkky) interactions in magnetically-doped graphene // *Crystals.* — 2013. — Vol. 3, no. 1. — P. 49.
- [164] Gate-controlled ionization and screening of cobalt adatoms on a graphene surface / V. W. Brar, R. Decker, H.-M. Solowan et al. // *Nat. Phys.* — 2011. — Vol. 7. — Pp. 43–47.

- [165] Influence of the degree of decoupling of graphene on the properties of transition metal adatoms / T. Eelbo, M. Wa śniowska, M. Gyamfi et al. // *Phys. Rev. B.* — 2013. — Vol. 87. — P. 205443.
- [166] Adatoms and clusters of 3d transition metals on graphene: Electronic and magnetic configurations / T. Eelbo, M. Wa śniowska, P. Thakur et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2013. — Vol. 110. — P. 136804.
- [167] Inhomogeneous electronic properties of monolayer graphene on ru(0001) / M. Gyamfi, T. Eelbo, M. Wa śniowska, R. Wiesendanger // *Phys. Rev. B.* — 2011. — Vol. 84. — P. 113403.
- [168] *Parhizgar F., Rostami H., Asgari R.* Indirect exchange interaction between magnetic adatoms in monolayer mos₂ // *Phys. Rev. B.* — 2013. — Vol. 87. — P. 125401.
- [169] *Mastrogiuseppe D., Sandler N., Ulloa S. E.* RKKY interaction and intervalley processes in p-doped transition-metal dichalcogenides // *Phys. Rev. B.* — 2014. — Vol. 90. — P. 161403.
- [170] *Saremi S.* RKKY in half-filled bipartite lattices: Graphene as an example // *Phys. Rev. B.* — 2007. — Vol. 76. — P. 184430.
- [171] *Brey L., Fertig H. A., Das Sarma S.* Diluted graphene antiferromagnet // *Phys. Rev. Lett.* — 2007. — Vol. 99. — P. 116802.
- [172] *Black-Schaffer A. M.* RKKY coupling in graphene // *Phys. Rev. B.* — 2010. — Vol. 81. — P. 205416.
- [173] A first-principles study on magnetic coupling between carbon adatoms on graphene / I. C. Gerber, A. V. Krashennnikov, A. S. Foster, R. M. Nieminen // *New J. Phys.* — 2010. — Vol. 12. — P. 113021.

- [174] *Sherafati M., Satpathy S.* RKKY interaction in graphene from the lattice green's function // *Phys. Rev. B.* — 2011. — Vol. 83. — P. 165425.
- [175] *Kogan E.* RKKY interaction in graphene // *Phys. Rev. B.* — 2011. — Vol. 84. — P. 115119.
- [176] *Sherafati M., Satpathy S.* Analytical expression for the RKKY interaction in doped graphene // *Phys. Rev. B.* — 2011. — Vol. 84. — P. 125416.
- [177] The electronic properties of graphene / A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres et al. // *Rev. Mod. Phys.* — 2009. — Vol. 81. — P. 109.
- [178] Landau-zener tunneling of a single t_{B3+} magnetic moment allowing the electronic read-out of a nuclear spin / M. Urdampilleta, S. Klyatskaya, M. Ruben, W. Wernsdorfer // *Phys. Rev. B.* — 2013. — Vol. 87. — P. 195412.
- [179] *Charlier J.-C., Blase X., Roche S.* Electronic and transport properties of nanotubes // *Rev. Mod. Phys.* — 2007. — Vol. 79. — Pp. 677–732.
- [180] *Klinovaja J., Loss D.* RKKY interaction in carbon nanotubes and graphene nanoribbons // *Phys. Rev. B.* — 2013. — Vol. 87. — P. 045422.
- [181] *Saremi S.* RKKY in half-filled bipartite lattices: Graphene as an example // *Phys. Rev. B.* — 2007. — Vol. 76. — P. 184430.
- [182] *Volkov V. A., Zagorodnev I. V.* Electrons near a graphene edge // *Low Temperature Physics.* — 2009. — Vol. 35, no. 1. — Pp. 2–5.
- [183] *Saffarzadeh A., Kirczenow G.* Scanning tunneling spectroscopy and dirac point resonances due to a single co adatom on gated graphene // *Phys. Rev. B.* — 2012. — Vol. 85. — P. 245429.