ЖЭТФ, 1999, том 115, вып. 3, стр. 1002–1015

СПИНОВЫЕ ЭФФЕКТЫ В МАГНИТОЕМКОСТИ ДВУМЕРНОГО ГАЗА ПОЛУПРОВОДНИКОВ С КЕЙНОВСКИМ И ДИРАКОВСКИМ СПЕКТРАМИ

*В. Ф. Раданцев**

Уральский государственный университет
620083, Екатеринбург, Россия

Поступила в редакцию 1 июня 1998 г.

Сравниваются результаты экспериментального исследования и моделирования магнитоосцилляций емкости приповерхностных слоев с двумерным газом в узкощелевом HgCdTe с прямой и инверсной структурами зон. Структура уровней Ландау рассчитывается в рамках имеющей ясную физическую интерпретацию модели, основанной на сведении матричных уравнений к уравнениям шредингеровского типа с эффективным потенциалом, в которой легко выделяются члены, ответственные за непараболичность и эффекты спинорного типа. Развит аналитический подход для описания магнитоосцилляционных явлений в двумерном газе материалов с квазирелятивистским спектром и указано на появление новых по отношению к материалам с параболическими зонами параметров теории. Определены параметры уширения уровней в спин-орбитально расщепленных субподзонах и обсуждаются доминирующие механизмы рассеяния.

1. ВВЕДЕНИЕ

Снятие спинового вырождения спектра двумерного электронного газа электростатическим потенциалом несимметричных квантовых ям за счет спин-орбитального взаимодействия является одним из интересных и активно обсуждаемых вопросов [1–12]. Наибольшей величины этот по существу релятивистского типа эффект достигает в узкощелевых полупроводниках. Наиболее надежные экспериментальные данные о параметрах расщепления получены при исследовании магнитоосцилляционных эффектов, причем анализ основывается, как правило, на измерении заселенностей спин-расщепленных субподзон из периодов осцилляций или их фурье-спектров. Информация о положении и амплитуде отдельных осцилляций в таком подходе игнорируется, а вместе с тем теряется и информация о точном энергетическом положении и уширении уровней Ландау. Фактически используемое при этом предположение о квазиклассичности магнитного квантования двумерного спектра не соответствует гамильтониану систем с сильным спин-орбитальным взаимодействием и не согласуется с экспериментом, свидетельствующим, в частности, о заметной непериодичности по обратному магнитному полю осцилляций для небольших номеров уровней Ландау. Вместе с неоднозначностью в определении фурье-частот (последние существенно и немонотонным образом зависят от анализируемых интервалов полей) это приводит к значительной погрешности в определении параметров расщепления, снижая тем самым уверенность в адекватности используемых моделей.

*E-mail: Victor.Radantsev@usu.ru

Более информативны методы, основанные на моделировании магнитоосцилляционных эффектов. В случае материалов с кейновским спектром на этом пути имеются серьезные трудности, обусловленные сложностью последовательно учитывающих эффекты спинорного типа самосогласованных расчетов спектра в магнитном поле и неразработанностью теории магнитоосцилляционных явлений в двумерном электронном газе полупроводников с квазирелятивистским спектром. Адекватность часто используемых для этих материалов подходов, основанных фактически на параболическом приближении, требует, по крайней мере, обоснования.

В настоящей работе исследованы обусловленные спин-орбитальным взаимодействием особенности энергетического спектра в магнитном поле и магнитоосцилляционных эффектов в приповерхностных квантовых ямах на основе кейновских полупроводников и их специфика в материалах с прямой и инверсной структурами зон. Наряду с экспериментальными исследованиями инверсионных и обогащенных слоев HgCdTe, проведенными методом магнитоемкостной спектроскопии, развита учитывающая эффекты спинорного типа теория для расчета уровней Ландау и описания магнитоосцилляционных эффектов в емкости. В свете решаемой здесь задачи моделирования наряду с нелимитированностью величины и знака щели на первый план выступает еще одно преимущество емкостных методов. Дифференциальная емкость, являясь по существу мерой плотности двумерных состояний, позволяет (при измерении ее абсолютных значений) получить информацию не только о структуре уровней Ландау, но и о параметрах их размытия, а следовательно, о доминирующих механизмах рассеяния, в том числе об их особенностях в системах с сильным спин-орбитальным взаимодействием. Это тем более актуально, что стандартные методы определения параметров уширения из-за нерегулярного характера осцилляций зачастую неприменимы в узкощелевых материалах.

2. ОСНОВНЫЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

В работе измерялись магнитоосцилляции емкости структур металл–окисел–полупроводник (МОП) на основе $Hg_{1-x}Cd_xTe$ с положительной (образец S1, $E_g = +80$ мэВ, $N_A - N_D = 1.8 \cdot 10^{16}$ см$^{-3}$) и отрицательной (образец P1, $E_g = -50$ мэВ, $N_D - N_A = 3 \cdot 10^{15}$ см$^{-3}$) кейновской щелью E_g с анодным окислом толщиной 700–1000 Å в качестве подзатворного диэлектрика как зависимости от магнитного поля B или от напряжения на полевом электроде V_g. Все представленные результаты относятся к $T = 4.2$ K. Примеры зависимостей осцилляций C и dC/dV_g от B приведены на рис. 1 и 2*а*, а на рис. 2*б* представлены зависимости $C(V_g)$ в магнитном поле $B = 4$ Тл. В осцилляциях отчетливо проявляются биения, а в фурье-спектрах — расщепление подзонных линий на дублеты, что свидетельствует о расщеплении подзонных поверхностей Ферми за счет спин-орбитального взаимодействия.

Несмотря на то что величина расщепления и особенно соотношение интенсивностей I_i^-/I_i^+ фурье-линий, соответствующих нижней и верхней спиновым субподзонам (i — номер двумерной подзоны), существенно зависят от анализируемого интервала полей (ясно, например, что для интервалов между узлами биений фурье-анализ не дает расщепления), можно выделить несколько характерных закономерностей. Если при небольших поверхностных концентрациях N_s интенсивности I_i^+ и I_i^- близки (для возбужденных подзон вблизи их стартов $I_i^+ > I_i^-$), то с ростом N_s имеет место, особенно для основной подзоны $i = 0$, значительное уменьшение отношения I_i^-/I_i^+. При пре-

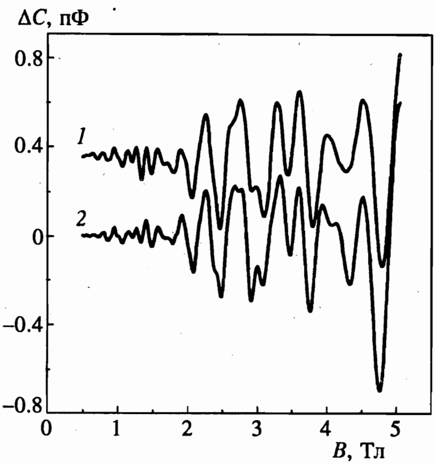

Рис. 1. Экспериментальные (*1*) и смоделированные (*2*) магнитоосцилляции емкости для образца S1 при $V_g = 2$ В ($N_s = 3.1 \times \times 10^{12}$ см$^{-2}$). Емкость окисла МОП-структуры $C_{ox} = 148$ пФ, площадь $S = 9 \cdot 10^{-4}$ см^2. Для ясности кривая *1* сдвинута вверх. При расчетах использованы значения $T_D = 13.5$ К для $i = 0$, $T_D = 10$ К для $i = 1$ и 9 К для $i = 2$

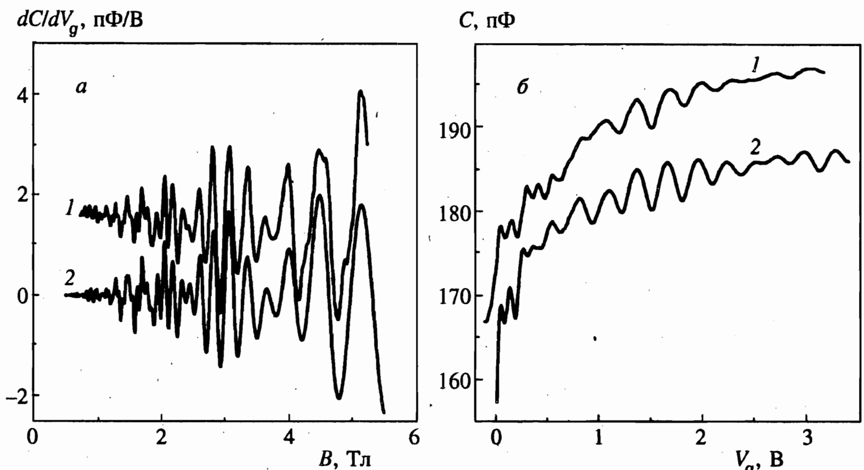

Рис. 2. Экспериментальные (*1*) и смоделированные (*2*) магнитоосцилляции dC/dV_g (*а*) при $V_g = 8$ В ($N_1 = 1.65 \cdot 10^{12}$ см$^{-2}$, $N_2 = 4.9 \cdot 10^{11}$ см$^{-2}$) и зависимости $C(V_g)$ в магнитном поле (*б*) при $B = 4$ Тл для образца P1; $C_{ox} = 195$ пФ, $S = 12 \cdot 10^{-4}$ см^2; $T_D = 9$ К для $i = 1$, $T_D = 6$ К для $i = 2$. Экспериментальная кривая $C(V_g)$ сдвинута вверх на 20 пФ

дельно высоких подзонных концентрациях $N_i > (2 \div 3) \cdot 10^{12}$ см$^{-2}$ наблюдается только одна фурье-линия, соответствующая, как показывает анализ зависимостей $N_i^{\pm}(V_g)$, не средней подзонной концентрации $(N_i^+ + N_i^-)/2$ (которая для областей N_i с отчетливо наблюдаемым спин-орбитальным расщеплением может быть определена из преобразования Фурье в интервале полей между узлами биений), а концентрации N_i^+ в верхней спиновой субподзоне.

Для HgCdTe с $E_g > 0$ спин-орбитальное расщепление в основной подзоне не проявляется также и при малых N_i, однако в этой области наблюдаются фурье-линии с удвоенной частотой, что связано с разрешением в осцилляциях отдельных спиновых компонент для малых номеров уровней Ландау ($n \leq 3$) и отчетливо проявляется в осцилляциях $C(V_g)$ (рис. 2*б*). В образцах с $E_g < 0$ отдельные спиновые компоненты в осцилляциях $C(V_g)$ и $C(B)$ не проявляются ни при каких режимах даже для основного уровня Ландау.

Подзонные и субподзонные концентрации в пределах экспериментальных погрешностей согласуются с рассчитанными в рамках подхода [8] фермиевскими квазиимпульсами. Относительные расщепления $\Delta N_i/N_i = (N_i^- - N_i^+)/(N_i^+ + N_i^-)$ при увеличении N_s стремятся в пределах погрешности ($\approx 20\%$) к своим предельным (практически одинаковым для разных подзон) «ультрарелятивистским» значениям ≈ 0.1 для HgCdTe с $E_g > 0$ и ≈ 0.18 для HgCdTe с инвертированными зонами [8].

3. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Для моделирования осцилляций магнитоемкости требуется решение трех относительно самостоятельных задач: 1) расчет энергетического положения уровней Ландау в самосогласованной приповерхностной квантовой яме; 2) вычисление на основе модельных предположений об уширении магнитных уровней плотности состояний, 3) расчет дифференциальной емкости области пространственного заряда с квантованным электрическим и магнитным полями спектром.

3.1. Спектр в магнитном поле

Сложность теоретического описания подзонных спектров в приповерхностных слоях кейновских полупроводников обусловлена не только матричным характером гамильтониана и неоднозначностью накладываемых на компоненты спинора граничных условий [13, 14], но и сложностью процедуры самосогласования ввиду зависимости волновых функций, описывающих распределение электронной плотности в направлении конфайнмента, от двумерного импульса, номера подзоны, спина, межзонного туннельного перемешивания. При наличии векторного потенциала прямые самосогласованные численные расчеты плотности состояний (не говоря о моделировании осцилляций емкости в зависимости от B или тем более глубины квантовой ямы) нереальны по трудоемкости и затратам машинного времени.

Представляется оправданным провести расчеты спектра в рамках подхода, развитого в работах [15, 16] для описания вакуумного конденсата дираковских электронов вблизи сверхзаряженных ядер и использованного в [8, 17] при анализе приповерхностных квантовых ям в кейновских и дираковских полупроводниках в отсутствие магнитного поля. При $B = 0$ этот подход хорошо согласуется, в том числе и в отношении эффектов спинорного типа, как с экспериментом, так и с прямыми численными расчетами [9]. (Отмеченное в [9] отличие подходов [9] и [8] относится к уникальному случаю пустых состояний вблизи дна подзоны для узкой и мелкой незаполненной квантовой ямы в HgCdTe с предельно высоким уровнем легирования $> 10^{19}$ см$^{-2}$; в стандартных условиях, в том числе для исследованных здесь образцов и режимов, оба подхода приводят к практически одинаковым результатам.)

В случае параллельного направлению ограничивающего потенциала $V(z)$ магнитного поля движение в двумерной плоскости может быть проквантовано и в рамках справедливой при малых E_g шестизонной модели задача расчета спектра $E(B)$, как нетрудно показать, сводится к матричному уравнению (мы не приводим зависящих от калибровки стандартных выражений, описывающих поведение волновых функций в перпендикулярной магнитному полю плоскости):

$$\left|\begin{matrix} H_{11} & H_{12} \\ H_{12} & H_{22} \end{matrix}\right| \begin{pmatrix} f_1^{n-1}(z) \\ f_3^{n-2}(z) \\ f_5^n(z) \\ f_2^n(z) \\ f_4^{n-1}(z) \\ f_6^{n-1}(z) \end{pmatrix} = 0; \quad H_{12} = \left|\begin{matrix} 0 & 0 & s_b\hbar\hat{k}_z \\ 0 & 0 & 0 \\ s_b\hbar\hat{k}_z & 0 & 0 \end{matrix}\right|,$$

$$H_{11} = \left|\begin{matrix} -E_- & \dfrac{\sqrt{3(n-1)}}{2}E_B & \dfrac{\sqrt{n}}{2}E_B \\ \dfrac{\sqrt{3(n-1)}}{2}E_B & -E_+ & 0 \\ \dfrac{\sqrt{n}}{2}E_B & 0 & -E_+ \end{matrix}\right|, \tag{1}$$

$$H_{22} = \left|\begin{matrix} -E_- & \dfrac{\sqrt{3(n+1)}}{2}E_B & -\dfrac{\sqrt{n}}{2}E_B \\ \dfrac{\sqrt{3(n+1)}}{2}E_B & -E_+ & 0 \\ -\dfrac{\sqrt{n}}{2}E_B & 0 & -E_+ \end{matrix}\right|,$$

где $E_\pm = E - V \pm E_g/2$, $s_b = \sqrt{|E_g|/2m_b}$ и m_b — объемные кейновские скорость и масса, n — номер уровня Ландау. «Магнитная энергия» $E_B = \sqrt{2m_b s_b^2 \hbar\omega_b} = \sqrt{2}\, s_b\hbar/\lambda$ ($\hbar\omega_b = \hbar eB/m_b c$ — циклотронная энергия), как и магнитная длина $\lambda = \sqrt{c\hbar/eB}$, фактически не зависит от зонных параметров, поскольку значение s_b для всех кейновских полупроводников практически одинаково. Действуя в духе работы [8], т. е. квадрируя систему относительно компонент f_1^{n-1}, f_2^n для электронных слоев в материалах с $E_g > 0$ (в дальнейшем «s-электроны») или f_5^n, f_6^{n-1} в материалах с $E_g < 0$ («p-электроны»), подзонные уравнения можно представить в одинаковом для «s- и p-электронов» виде — в виде системы двух уравнений шредингеровского типа для огибающих $\varphi_{2.5}^n = f_{2.5}^n/\sqrt{H_n^+}$, $\varphi_{1.6}^{n-1} = f_{1.6}^{n-1}/\sqrt{H_n^-}$:

$$\left|\begin{matrix} \dfrac{\hbar^2\hat{k}_z^2}{2m_b} - (E_{eff} - U_0 - U_B^+ - U_R^+) & -iU_{so}^+ - C_g^+\hat{k}_z \\ iU_{so}^- + C_g^-\hat{k}_z & \dfrac{\hbar^2\hat{k}_z^2}{2m_b} - (E_{eff} - U_0 - U_B^- - U_R^-) \end{matrix}\right| \begin{pmatrix} \varphi_{2.5}^n \\ \varphi_{1.6}^{n-1} \end{pmatrix} = 0 \tag{2}$$

с эффективной энергией $E_{eff} = (E^2 - m_b^2 s_b^4)/2m_b s_b^2$ и зависящим от энергии эффективным потенциалом, содержащим клейн-гордоновский член $U_0 = (V^2 - 2EV)/2m_b s_b^2$ и потенциалы спинорного типа:

$$U_B^\pm = E_B^2\left[g^2 nR^\pm + 3(n \pm 1)\right]/2m_b s_b^2$$

— «магнитный» потенциал,

$$U_R^\pm = \frac{s_b^2\hbar^2}{2m_b s_b^2}\left\{\left[\frac{3}{4}\left(\frac{1+L_n^\pm}{H_n^\pm}\right)^2 + \frac{L_n^\pm}{H_n^\pm E_+}\right]\left(\frac{dV}{dz}\right)^2 + \frac{1+L_n^\pm}{H_n^\pm}\frac{d^2V}{dz^2}\right\}$$

— потенциал, ответственный за «туннельное» межзонное перемешивание,

$$U_{so}^{\pm} = g\frac{s_b\hbar E_B}{4m_b s_b^2}\sqrt{nR_n^{\mp}}\left[\left(\frac{1+L_n^{\pm}}{H_n^{\pm}} + \frac{1+L_n^{\mp}}{2H_n^{\mp}}(R_n^{\pm}-1)\right)\frac{dV}{dz}\right]$$

— спин-орбитальный член, где

$$C_g^{\pm} = C_g\sqrt{R_n^{\mp}}\cdot(R_n^{\pm}-1), \quad C_g = g\frac{s_b\hbar E_B\sqrt{n}}{4m_b s_b^2}, \quad R_n^{\pm} = \frac{H_n^{\pm}}{H_n^{\mp}}.$$

В фигурирующих здесь выражениях следует положить $g=-1$, $L_n^{\pm} = 3E_B^2(n\pm 1)/4E_+^2$, $H_n^{\pm} = E_- - L_n^{\pm}E_+$ для «p-электронов» и $g=+1$, $L_n^{\pm}=0$, $H_n^{\pm}=E_+$ (при этом $R_n^{\pm}=1$) для «s-электронов» (безразмерный параметр $L_n^{\pm}$, как и второй член в выражении для $U_B^{\pm}$, возникает от вклада зоны тяжелых дырок). Нетрудно показать, что уравнение для кейновских «s-электронов», но с $g=+2$ описывает также и подзонные уровни Ландау в случае дираковского спектра. За счет спин-орбитального взаимодействия $U_{so}^{\pm}$ (а для «p-электронов» также за счет линейных по $\hat{k}_z$ членов) система (2) в отличие от таковой при $B=0$ [8] не разделяется на независимые уравнения для отдельных спиновых компонент.

В дальнейшем при вычислении самосогласованного потенциала $V(z)$ и при квантовании спектра в эффективном потенциале будет, как и в [8], использован квазиклассический подход (ясно, что переход к квазиклассике непосредственно в уравнении (1) приводит к потере эффектов спинорного типа, что эквивалентно клейн-гордоновскому приближению, учитывающему только эффекты непараболичности). При стандартной подстановке

$$\varphi_i^m = C_i^m \exp\left[i\int k_z(z)dz\right]$$

и в пренебрежении членами, пропорциональными $i(zdk_z/dz + k_z)^2$ (членами высшего порядка в разложении действия по степеням $\hbar$), система (2) приводит к следующему выражению для k_z:

$$k_z^{\pm} = \frac{\sqrt{2m_b s_b^2}}{s_b\hbar}\left(\frac{A}{2}\mp\sqrt{\frac{A^2}{4}-(E_{eff}-U_0-U_B^+-U_R^+)(E_{eff}-U_0-U_B^--U_R^-)+U_{so}^+U_{so}^-}\right)^{1/2}, \quad (3)$$

где $A = 2(E_{eff}-U_0)-(U_B^++U_R^++U_B^-+U_R^-)-(2m_b s_b^2/s_b^2\hbar^2)C_g^2(R_n^+-1)(R_n^--1)$, что совместно с правилом квантования Бора—Зоммерфельда (удобно перейти к интегрированию по V, поскольку для самосогласованных потенциалов уравнение Пуассона непосредственно дает dV/dz как функцию V)

$$\int\limits_{V(z=0)}^{V(k_z=0)} k_z(E,V)\left(\frac{dV}{dz}\right)^{-1} dV = \pi\left(i+\frac{3}{4}\right) \quad (4)$$

и определяет магнитные уровни $E_n^{\pm}(i,B)$ в квантовой яме $V(z)$. Как и в случае нулевого магнитного поля, величина 3/4 для фазового фактора в (4) соответствует бесконечно высокому потенциальному барьеру для «s»- или «p-электронов» на границе с диэлектриком, т. е. нулевым граничным условиям для соответствующих компонент спинора

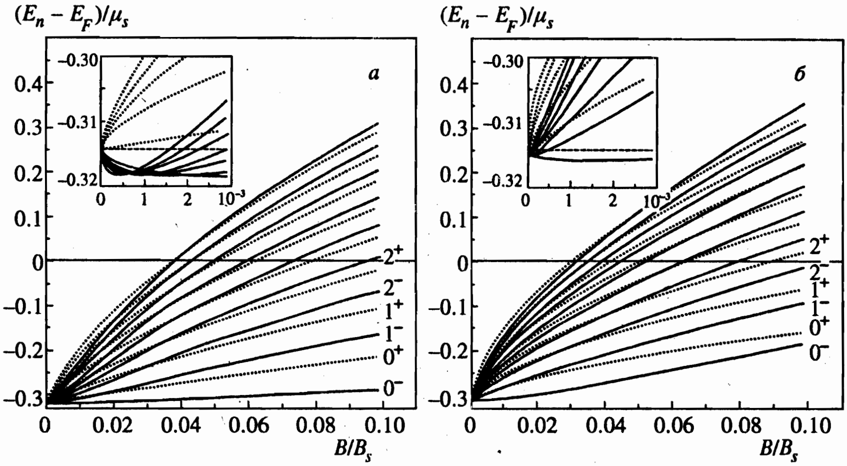

Рис. 3. Уровни Ландау основной подзоны для «s-» (*а*) и «p-» (*б*) электронов в «квазиультрарелятивистском» пределе $E_g = 0$. Энергии отсчитываются от уровня Ферми E_F

(другие компоненты при этом в нуль не обращаются), граничные же условия со стороны объема диктуются наличием непроницаемого потенциального барьера в эффективном потенциале [8, 15–18].

Для дираковских электронов полученный результат может рассматриваться учитывающим спиновые эффекты и магнитное квантование обобщением результата [18]. В случае кейновских «s-электронов» приходим к результату работы [19]. Нетрудно видеть, что при $n \to \infty$, $E_B\sqrt{n \pm 1}$, $E_B\sqrt{n} \to s_b\hbar k_z$ (k_z — двумерный квазиимпульс) (3), (4) описывают подзонные спектры $E_i^{\pm}(k_s)$ в отсутствие магнитного поля (переходят в соответствующие результаты работы [8]), а при $V = \text{const}$ соотношение (3) описывает подзоны Ландау $E_n^{\pm}(B, k_z)$ в объеме кейновского (дираковского) полупроводника. Отметим, что для «p-электронов» пропорциональные C_g члены в (3) (возникающие от линейных по $\hat{k}_z$ членов в (2)) не дают, вообще говоря, заметного по сравнению с $U_{so}^{\pm}$ вклада, однако в расчетах, не учитывающих спин-орбитальное взаимодействие, их игнорирование приводит к существенным погрешностям, вплоть до изменения порядка следования спиновых уровней.

В ультрарелятивистском пределе $E_g = 0$ в нелегированных квантовых ямах спектры, как и в случае $B = 0$, масштабно-инвариантны по отношению к глубине ямы μ_s и приведены для электронов «s» ($E_g = +0$) и «p» ($E_g = -0$) на рис. 3 в безразмерных координатах $E/\mu_s - B/B_s = (E_B/\mu_s)^2$ ($B_s = c\mu_s^2/2es_b^2\hbar$). Спин-орбитальное взаимодействие и межзонное резонансное перемешивание приводят к столь кардинальной перестройке спектра, что введение g-фактора (существенно нерелятивистской характеристики) для описания спинового расщепления двумерного спектра в магнитном поле теряет смысл даже для малых номеров уровней Ландау. Величины эффектов для «s»- и «p-электронов» существенно различны как в области малых энергий (см. вставки на рис. 3), так и для тестируемых в осцилляционных эффектах состояний вблизи уровня Ферми, где вклад спин-орбитального члена для «p-электронов» почти вдвое больше. Для дираковских электронов в связи с большим для них значением параметра $g = 2$

спин-орбитальное расщепление при всех энергиях вдвое больше, чем для «s-электронов» ($g = 1$) и на уровне Ферми близко к таковому для «p-электронов». Во всех трех случаях спектры не могут быть описаны формулой Бычкова—Рашба с не зависящим от квазиимпульса параметром спин-орбитального взаимодействия α [1].

3.2. Плотность состояний

Плотность состояний, особенности в которой ответственны за магнитоосцилляции кинетических и термодинамических характеристик, определяется как положением уровней Ландау, так и параметрами их уширения. Расчет столкновительного уширения магнитных уровней является сложной проблемой даже в однозонном приближении [20, 21]. Мы проведем рассмотрение в предположении невзаимодействующих субподзонных уровней Ландау гауссовой формы [22, 23]

$$D_i^{\pm}(E) = \frac{eB}{c\hbar\sqrt{2\pi^3}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{\Gamma_i^{\pm}} \exp\left[2\left(-\frac{E - E_{ni}^{\pm}}{\Gamma_i^{\pm}}\right)^2\right] \tag{5}$$

с не зависящими явно от n, но зависящими от B, а для рассматриваемой непараболической системы и от энергии, параметрами уширения $\Gamma_i^{\pm}$. Для аналитического описания магнитоосцилляционных эффектов, предпочтительного как ввиду большей физической ясности результатов, так и с точки зрения выяснения специфики осцилляционных явлений в двумерных системах с квазирелятивистскими спектрами по сравнению со случаем стандартных зон [22], мы используем хорошо согласующиеся с численными расчетами аналитические аппроксимации для субподзонных законов дисперсии в виде дисперсионных соотношений релятивистского типа

$$E_i^{\pm}(k) = \sqrt{(s_i^{\pm}\hbar k)^2 + \left[m_{0i}^{\pm}(s_i^{\pm})^2\right]^2} - m_{0i}^{\pm}(s_i^{\pm})^2 \tag{6}$$

с зависящими от поверхностного химического потенциала μ_s субподзонными кейновскими массами $m_{0i}^{\pm}$ и скоростями $s_i^{\pm}$, величины которых могут быть найдены из расчетных подзонных концентраций и эффективных масс на уровне Ферми [8]. Использование соответствующего такому представлению аналитического описания квазиклассического спектра в магнитном поле (ниже субподзонные индексы «±» для упрощения записи опущены)

$$E_{ni} = \sqrt{E_{Bi}^2(n_i + \delta_i) + m_{i0}^2 s_i^4} - m_{i0}s_i^2 \tag{7}$$

($E_{Bi} = \sqrt{2}\, s_i\hbar/\lambda$) вместо численных решений уравнения (4) с k_z из (3) не может существенно отразиться на виде плотности состояний и амплитудах осцилляций (при вычислении энергетического положения уровней следует использовать основанные на (3), (4) «точные» решения). Подставляя (7) в (5) и используя формулу суммирования Пуассона, прямыми вычислениями в предположении $\Gamma_i \ll E + m_{0i}s_i^2$, что оправдано даже для состояний вблизи дна подзон, приходим к удобному при описании осцилляционных эффектов «гармоническому» представлению для плотности состояний:

$$D_i(E) = \frac{E + m_{0i}s_i^2}{2\pi s_i^2\hbar^2}\sqrt{\frac{\pi}{2}} \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(-1)^j(2 - \delta_{j0})}{(1 + j^2\pi^2\gamma_i^4)^{5/4}} (\cos\theta + j\pi\gamma_i \sin\theta) \times$$

$$\times \exp\left[-\frac{2}{1 + j^2\pi^2\gamma_i^4}\left(\frac{j\pi\Gamma_i(E + m_{0i}s_i^2)}{E_{Bi}^2}\right)^2\right], \tag{8}$$

где

$$\gamma_i = \frac{\Gamma_i}{E_{Bi}}, \quad \theta = \frac{1}{2}\operatorname{arctg}(j\pi\gamma_i^2) + j\pi\gamma_i^2\left[\frac{2(E+m_{0i}s_i^2)^2}{\Gamma_i^2(1+j^2\pi^2\gamma_i^4)^2} - \frac{m_{0i}^2 s_i^4 + \delta_i E_{Bi}^2}{\Gamma_i^2}\right],$$

δ_{j0} — символ Кронекера. В рамках борновской аппроксимации параметры уширения Γ_i связаны с временем релаксации τ_i импульса в отсутствие магнитного поля соотношением $\Gamma_i^2 = \sqrt{2/\pi}\,\hbar^2\omega_{ci}(E)/\tau_i$ [20], $\omega_{ci}(E) = eB/cm_{ci}(E)$, $m_{ci}(E) = m_{0i}+E/s_i^2$, и выражение (8) в предположении не слишком сильного уширения уровней $\gamma_i^2 \ll 1$ упрощается:

$$D_i(E,B) = D_i(E,0)\left[1 + 2\sum_{j=1}^{\infty}(-1)^j \exp\left(-\frac{j^2\pi}{\omega_{ci}(E)\tau_i}\right)\cos\left(2\pi j n_i(E)\right)\right], \qquad (9)$$

где $D_i(E,0) = m_{di}(E)/2\pi\hbar^2 = (E+m_{0i}s_i^2)/2\pi s_i^2\hbar^2$ — плотность состояний при $B = 0$ (отметим, что в двумерном случае эффективная масса плотности состояний m_{di} совпадает с циклотронной m_{ci}). Номер уровня Ландау n_i, рассматриваемый в (9) как произвольное (не обязательно целое) число, определяется при заданной энергии уравнениями (3), (4), либо, в простейшей аппроксимации, выражением (7). Соответствующие циклотронные энергии также могут быть определены из (4) как $\hbar\omega_c(E) = E(n+0.5) - E(n-0.5)$, однако результаты слабо отличаются от тех, что дает использование аналитических аппроксимаций для ω_{ci}. Легко видеть, что в нерелятивистском пределе $s_i \to \infty$ выражение (9) при $j = 1$ переходит в формулу Андо [22].

Прямое сопоставление основанных на (5) и (8) расчетов свидетельствует об адекватности использованных при выводе (9) приближений практически для всех актуальных в экспериментальном отношении режимов и параметров, соответствующих как синусоидальной (высокие температуры Дингла $T_D = \hbar/2k_B\pi\tau$), так и «негармонической» (низкие T_D) форме $D(E)$.

3.3. Магнитоосцилляции емкости

Для систем с многоподзонным спектром дифференциальная емкость области пространственного заряда с двумерным электронным газом,

$$C_{sc} = e^2\frac{dN_s}{d\mu_s} = e^2\frac{d}{d\mu_s}\sum_{i,\sigma} N_{i\sigma} = \sum_{i,\sigma} C_{i\sigma} \qquad (10)$$

($N_{i\sigma}$ — поверхностная концентрация в спиновой ветви σ подзоны i), определяется суммой парциальных субподзонных емкостей (как и выше, субподзонные индексы $\sigma = \pm$ далее опущены):

$$C_i = \frac{e^2 dN_i}{d\mu_s} = \frac{e^2 dN_i}{d\mu_{Fi}}\frac{d\mu_{Fi}}{d\mu_s} = \frac{e^2}{\pi s^2\hbar^2}\frac{d\mu_{Fi}}{d\mu_s}\frac{d}{d\mu_{Fi}}\int D_i(E) f(E-\mu_{Fi})dE, \qquad (11)$$

где $f(E-\mu_{Fi})$ — функция распределения Ферми—Дирака, μ_{Fi} — подзонная энергия Ферми. Используя (9) и пренебрегая интегралами от нечетных функций, что оправдано для достаточно низких температур $kT \ll \mu_{Fi}$, приходим к следующему выражению для емкости в магнитном поле:

$$\frac{C_i(B)}{C_i(0)} = 1 - 2\sum_j (-1)^j \exp\left(-\frac{j^2\pi}{\omega_{ci}\tau_i}\right) \int_0^\infty dy \left\{\cos(2\pi j n_i) \left[\cos(2\pi j c_{Bi}^2 y^2) - \right.\right.$$
$$- (jc_{\tau i} + c_{Ti} y \operatorname{tg}(jb_i y)) \sin(2\pi j c_{Bi}^2 y^2)\Big] - \sin(2\pi j n_i) \left[\sin(2\pi j c_{Bi}^2 y^2) + \right.$$
$$\left.\left. + \; (jc_{\tau i} + c_{Ti} y \operatorname{tg}(jb_i y)) \cos(2\pi j c_{Bi}^2 y^2)\right]\right\} \frac{\cos(jb_i y)}{2\operatorname{ch}^2(y/2)}, \qquad (12)$$

где

$$y = (E - \mu_{Fi})/kT, \quad \omega_{ci} = \omega_{ci}(\mu_{Fi}), \quad b_i = 2\pi kT/\hbar\omega_{ci},$$

$$c_{Ti} = K_{mi}\frac{kT}{\mu_{Fi}}, \quad c_{\tau i} = K_{mi}\frac{\hbar}{2\tau_i\mu_{Fi}}, \quad c_{Bi} = \frac{kT}{E_{Bi}} = \frac{kT\lambda}{\sqrt{2}\, s_i\hbar},$$

$$K_{mi} = \left[1 + \frac{d(m_{0i}s_i^2)}{d\mu_{Fi}}\right]\left[1 + \frac{m_{0i}s_i^2}{\mu_{Fi}} + \frac{d(m_{0i}s_i^2)}{d\mu_{Fi}}\right]^{-1},$$

$$C_i(0) = \frac{e^2 dN_i}{d\mu_{Fi}}\frac{d\mu_{Fi}}{d\mu_s} = \frac{e^2\mu_{Fi}}{2\pi s_i^2\hbar^2}\left[1 + \frac{m_{0i}s_i^2}{\mu_{Fi}} + \frac{d(m_{0i}s_i^2)}{d\mu_{Fi}}\right]\frac{d\mu_{Fi}}{d\mu_s} =$$
$$= e^2\left[D_i(\mu_{Fi}, 0) + \frac{\mu_{Fi}}{2\pi s_i^2\hbar^2}\frac{d(m_{0i}s_i^2)}{d\mu_{Fi}}\right]\frac{d\mu_{Fi}}{d\mu_s}.$$

Отметим, что имеющая место в параболическом приближении эквивалентность между емкостью в нулевом магнитном поле $C_i(0)$ и величиной $D(\mu_F, 0)e^2 d\mu_F/d\mu_s$ (фактически плотностью состояний на уровне Ферми) для рассматриваемой системы со спектром релятивистского типа нарушается. По сравнению со случаем параболического спектра выражение для магнитоосцилляций (12) содержит новые параметры теории c_T, c_τ, c_B. Первые два обусловлены зависимостями эффективной массы плотности состояний m_{di} и циклотронной массы m_{ci} в экспоненциальном дингловском факторе от энергии. При этом существенны два эффекта — непараболичность подзонных спектров (при фиксированной глубине ямы) и изменение параметров подзонных спектров ($m_{0i}^{\pm}(\mu_s)$) при модуляции глубины ямы. Параметр c_B (для случая дираковских электронов в слаборелятивистской системе $\mu_F \le ms^2$, и без учета столкновительного уширения на появление такого параметра в теории указано в [24]) фактически определяется только отношением $T/\sqrt{B}$ и не зависит от зонных или подзонных параметров, поскольку субподзонные кейновские скорости $s_i^{\pm}(\mu_s)$ мало отличаются от универсальной величины s_b.

Для достаточно сильных магнитных полей фаза $2\pi j c_B^2 y^2$ в области y, дающей основной вклад в интеграл, стационарна и (12) может быть проинтегрировано:

$$\frac{C_i(B)}{C_i(0)} \approx 1 - 2\sum_j (-1)^j \frac{j\pi b_i}{\operatorname{sh}(j\pi b_i)} \exp\left(-\frac{j^2\pi}{\omega_{ci}\tau_i}\right)\left[\cos(2\pi j n_i) - jc_{\tau i}\sin(2\pi j n_i)\right]. \qquad (13)$$

Отметим квадратичную зависимость в двумерном случае аргументов дингловских экспонент от номера гармоники j в выражениях для магнитоосцилляций (9), (12), (13). В нерелятивистском приближении $s_i \to \infty$ величины $c_{Ti} = c_{\tau i} = c_{Bi} = 0$ (в случае $c_{Ti} = c_{Bi} = 0$ переход от (12) к (13) является точным) и (13) для $j = 1$ переходят в выражение Андо для магнитоосцилляций в материалах с параболическими зонами [20, 22].

Адекватность параболического приближения при описании осцилляций в материалах с непараболическим спектром (с заменой массы покоя в амплитудном факторе на циклотронную массу на уровне Ферми), как видно, ограничена областью достаточно сильных магнитных полей $E_{Bi} > (5 \div 10)kT$ и не слишком сильного размытия уровней $\mu_{Fi} \geq \hbar/2\tau_i$.

При спин-орбитальном расщеплении отдельные спиновые ветви различаются как плотностью состояний, так и циклотронной энергией и парциальные осцилляции емкости для спиновых субподзон различаются не только периодами (что приводит к наблюдаемым экспериментально биениям), но и амплитудами, в том числе и при равных временах релаксации. При этом, хотя плотность состояний и, следовательно, парциальная емкость для низкоэнергетической ветви спектра при $B = 0$ выше, амплитуда осцилляций для этой субподзоны из-за больших значений циклотронных масс, входящих в параметр b и в дингловский экспоненциальный фактор, может быть, особенно для «p-электронов», меньше. Таким образом, наблюдаемая экспериментально разница в амплитудах различных спиновых компонент осцилляций (впервые на это было указано, по-видимому, в работах [25, 5]) является естественной для систем с сильной спин-орбитальной связью и не требует привлечения представлений о зависящем от спина рассеянии. Ясно, что соотношение амплитуд зависит как от поверхностной концентрации (через субподзонные эффективные массы), так и от магнитного поля, температуры и параметров уширения.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ И ОБСУЖДЕНИЕ

При расчетах емкости МОП-структур $C(B) = C_{ox}C_{sc}(B)/[C_{ox} + C_{sc}(B)]$ использовались значения геометрической емкости окисла C_{ox}, определенные из экспериментальных значений емкости в области больших отрицательных изгибов зон, соответствующих сильному обогащению дырками (вольт-фарадные характеристики исследованных структур, в том числе с $E_g > 0$, вплоть до частот ~ 1 МГц низкочастотного типа). Субподзонные емкости в нулевом магнитном поле и напряжения на структурах V_g (при расчетах dC/dV_g) рассчитывались из зависимостей субподзонных концентраций от поверхностного потенциала в рамках подхода [8]. Для инверсионных слоев учитывалось существенное для узкощелевых и особенно для бесщелевых полупроводников (ввиду близости в них толщины инверсионного слоя к общей толщине области пространственного заряда) возрастание с μ_s поверхностной плотности нескомпенсированного дырками заряда акцепторов в слое обеднения. Расчетные емкости в нулевом магнитном поле, как правило, хорошо согласуются с их экспериментальными значениями.

Хотя структура осцилляций, смоделированных с использованием в качестве подгоночного параметра только температуры Дингла, близка к экспериментальным при той же двумерной концентрации, точные положения как экстремумов осцилляций, так и узлов биений отличаются. Это неудивительно, поскольку в использованной шестизонной модели игнорируется вклад удаленных зон в объемный g-фактор, к величине которого положение спиновых компонент уровней Ландау весьма чувствительно. Что касается периодов биений, то сопоставление смоделированных и измеренных осцилляционных кривых указывает на заметное (до 20% для основной и $\approx 10\%$ для возбужденных подзон) занижение теорией величины спин-орбитального расщепления в материалах с положительной щелью, тогда как при анализе, основанном на субподзонных заселенностях, расхождений из-за большой экспериментальной погрешности, как указывалось в разд. 2, не выявляется. Различия могут быть связаны с вкладом в спин-орбитальное расщепление области интерфейса [11] (что не может быть последовательно рассчитано в рамках метода эффективной массы) или с приближенным характером расчетов поверхностного потенциала $V(z)$. В обоих случаях поправки в рамках механизма Рашба должны быть пропорциональны электрическому полю и могут быть феноменологически учтены введением множителя в спин-орбитальном члене эффективного гамильтониана. Действительно, расхождения устраняются введением одинаковых для всех концентраций, номеров подзон, температур и параметров уширения множителя $\simeq 1.2$ в U_{so} и поправки к фазе осцилляций, моделирующей вклад в g-фактор удаленных зон.

Представленные на рис. 1, 2 смоделированные магнитоосцилляции находятся в хорошем согласии с экспериментом в отношении как положения осцилляций и узлов биений по магнитному полю, так и абсолютных значений емкости. В расчетах, как отмечено выше, использованы два подгоночных параметра для «p-электронов» (T_D и поправка к фазе осцилляций) и три для «s-электронов» (дополнительно указанный выше множитель при U_{so}). При всех режимах и для всех интервалов магнитных полей и температур, при которых в исследованных материалах экспериментально удается наблюдать осцилляции емкости, расчеты, основанные на (12), фактически не отличаются от результатов, полученных в приближении (13). Вклад синусоидального члена в (13) также, как правило, несуществен. Абсолютные значения амплитуд осцилляций емкости и их зависимости от магнитного поля удовлетворительно описываются теорией в предположении близости используемых при моделировании как подгоночных параметров времен релаксации τ_i в спин-расщепленных субподзонах. В отдельных случаях, когда экспериментально наблюдается до трех узлов биений, удается, используя цифровую фильтрацию и обратное преобразование Фурье, уверенно выделить относящиеся к отдельным субподзонам «парциальные» осцилляции. Определенные из таких осцилляций времена релаксации для разных спиновых субподзон в пределах погрешности одинаковы, хотя амплитуды I^+ и I^- при этом могут сильно (до нескольких раз) различаться. Отметим, что в этих случаях значения τ_i, определенные из магнитополевых зависимостей амплитуд осцилляций, близки к величинам, полученным из подгонки расчетных абсолютных значений амплитуд осцилляций к их экспериментальным величинам.

Зависимости $T_D(N_s)$ с минимумом при $N_s \approx 2 \cdot 10^{12}$ см$^{-2}$ (для образца S1 приведены на рис. 4) подобны по форме к таковым для инверсионных слоев кремния. Однако в отличие от последних убывающий участок не связан с экранированием кулоновского рассеяния, поскольку предсказываемые теорией значения T_D, соответствующие рассеянию на встроенном в окисел заряде и ионизованных примесях, для исследованных структур по крайней мере на порядок меньше измеренных. При дальнейшем росте концентрации температура T_D возрастает, что характерно для рассеяния на шероховатостях поверхности, однако зависимость $T_D(N_s)$ далека от квадратичной, более того — существенно сублинейна. Последнее указывает на заметное подавление эффективности этого механизма при уменьшении фермиевской длины волны де Бройля, что возможно при достаточно больших значениях корреляционных длин L. Наилучшее согласие рассчитанных в рамках использованного в [26] подхода значений T_D с экспериментом для исследованных структур достигается при средней флуктуации $\Delta \approx 20$–25 Å и корреляционной длине $L \approx 100$–120 Å, что почти на порядок больше соответствующих величин в Si. Значения L более чем вдвое превышают и имеющиеся данные для бинарных полупроводников [26], что неудивительно ввиду большей дефектности границ

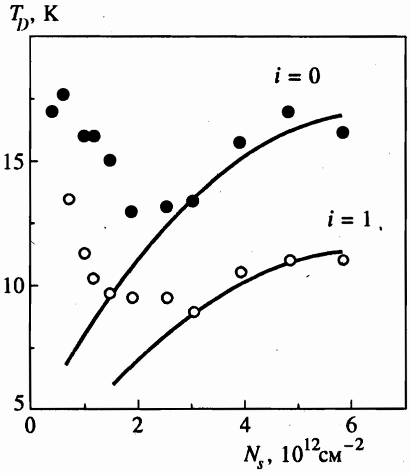

Рис. 4. Зависимость температуры Дингла от двумерной концентрации для образца S1. Сплошные линии — расчет для рассеяния на шероховатостях поверхности при $L = 110$ Å и $\Delta = 20$ Å

раздела тройных соединений с их окислами. Сильное уширение уровней вблизи стартов подзон свидетельствует о включении дополнительного канала релаксации и может быть связано с межподзонным (межсубподзонным) рассеянием, эффективность которого уменьшается при увеличении N_s за счет роста межподзонных энергий. Проведение последовательных расчетов такого рассеяния представляет отдельную проблему, сложность которой обусловлена не только сложностью спектра, но и необходимостью учета экранирования и многоэлектронных эффектов, поскольку в рассматриваемых системах фермиевские длины волн при всех режимах оказываются, как это можно показать, основываясь на результатах [8], величинами того же порядка, что и длины экранирования Томаса—Ферми и протяженности волновых функций в направлении конфайнмента.

Если в смоделированных осцилляциях структур на основе материалов с $E_g > 0$ отчетливо разрешаются отдельные спиновые компоненты для небольших номеров уровней Ландау, то при $E_g < 0$, когда величина спин-орбитального расщепления значительно выше и, соответственно, разница в циклотроном расщеплении для разных спиновых субподзон больше, это не имеет места ни при каких реалистичных значениях параметров уширения даже при самых низких температурах, что полностью согласуется с экспериментом. Отметим, что ухудшение в разрешении спинового расщепления с ростом температуры и уширения уровней в осцилляциях структур с $E_g > 0$ обусловлено не только увеличением размытия фермиевской ступеньки («спектральной щели»), но и (в основном при малых B и высоких T) значительно более быстрым уменьшением амплитуды осцилляций для низкоэнергетической ветви спектра.

В заключение кратко подытожим представленные результаты. Предложена относительно простая и имеющая ясную физическую интерпретацию модель расчета энергетического спектра двумерного электронного газа в магнитном поле в приповерхностных квантовых ямах полупроводников с кейновским и дираковским спектрами, основанная на сведении исходных матричных уравнений к уравнению шредингеровского типа с эффективным потенциалом, в котором легко выделяются члены, ответственные за непараболичность, спин-орбитальное взаимодействие и межзонное «туннельное» перемешивание, и ясно видна специфика для кейновских полупроводников с прямой и инверсной структурами зон и с дираковским спектром. Развит аналитический подход для описания магнитоосцилляционных эффектов в двумерном газе материалов с квазирелятивистским спектром и указано на появление новых по отношению к материалам с квадратичным спектром параметров теории. Сравнение смоделированных и экспериментальных осцилляций магнитоемкости в МОП-структурах на основе HgCdTe свидетельствует о возможном, хотя и небольшом (< 20%), вкладе области интерфейса в спин-орбитальное расщепление спектра. Экспериментально обнаружено и теоретически подтверждено значительное различие амплитуд осцилляций, относящихся к двум спин-орбитально расщепленным лестницам уровней Ландау при равенстве параметров их столкновительного уширения. Найденные средние смещения границ раздела и корреляционные длины, характеризующие рассеяние на шероховатостях поверхности, многократно превышают их значения в кремнии и бинарных полупроводниках в согласии с большей дефектностью интерфейса между тройными соединениями и их окислами. Малые значения времен релаксации вблизи стартов двумерных подзон и их рост с увеличением двумерной концентрации N_s в области небольших N_s связывается с межподзонным рассеянием.

Работа выполнена при поддержке Министерства общего и профессионального образования Российской Федерации (грант 97-0-7.1-137).

Литература

1. Yu. A. Bychkov and E. I. Rashba, J. Phys. C **17**, 6039 (1984).
2. С. И. Дорожкин, Е. Б. Ольшанецкий, Письма в ЖЭТФ **46**, 399 (1987).
3. В. Ф. Раданцев, ЖЭТФ **96**, 1793 (1989).
4. R. Sizmann and F. Koch, Semicond. Sci. Technol. **5**, 5115 (1990).
5. J. Luo, H. Munekata, F. F. Fang et al., Phys. Rev. B **41**, 7685 (1990).
6. B. Das, S. Datta, and R. Reifenberger, Phys. Rev. B **41**, 8278 (1990).
7. A. V. Germanenko, G. M. Minkov, V. A. Larionova et al., Phys. Rev. B **52**, 17254 (1995).
8. V. F. Radantsev, T. I. Deryabina, G. I. Kulaev, and E. L. Rumyantsev, Phys. Rev. B **53**, 15756 (1996).
9. A. V. Germanenko, G. M. Minkov, V. A. Larionova et al., Phys. Rev. B **54**, 1841 (1996).
10. С. И. Дорожкин, Г. Ландвер, Письма в ЖЭТФ **64**, 630 (1996).
11. G. Engels, J. Lange, Th. Schapers et al., Phys. Rev. B **55**, R1958 (1997).
12. J. Nitta, T. Akazaki, H. Takayanagi et al., Phys. Rev. Lett. **78**, 1335 (1997).
13. P. Sobkowicz, Semicond. Sci. Technol. **5**, 183 (1990).
14. M. J. Godfrey and A. M. Malik, Phys. Rev. B **53**, 16504 (1996).
15. Я. Б. Зельдович, В. С. Попов, УФН **105**, 403 (1971).
16. А. Б. Мигдал, В. С. Попов, Д. Н. Воскресенский, ЖЭТФ **72**, 834 (1977). А. Б. Мигдал, *Фермионы и бозоны в сильных полях*, Наука, Москва (1978).
17. V. F. Radantsev, Semicond. Sci. Technol. **8**, 394 (1993).
18. Г. И. Артимович, В. И. Ритус, ЖЭТФ **104**, 2912 (1993).
19. F. Ohkawa and Y. Uemura, J. Phys. Soc. Jap. **37**, 1325 (1974).
20. T. Ando, A. B. Fowler, and F. Stern, Rev. Mod. Phys. **54**, 494 (1982).
21. L. Spies, W. Apel, and B. Kramer, Phys. Rev. B **55**, 4057 (1997).
22. T. Ando, J. Phys. Soc. Jap. **37**, 1233 (1974).
23. R. Gerhardts, Z. Phys B **21**, 275 (1975).
24. А. С. Вшивцев, К. Г. Клименко, Письма ЖЭТФ **109**, 954 (1996).
25. В. Ф. Раданцев, Т. И. Дерябина, Л. П. Зверев и др., ЖЭТФ **88**, 2088 (1985).
26. В. Ф. Раданцев, Т. И. Дерябина, Л. П. Зверев и др., ЖЭТФ **91**, 1016 (1986).