

# AlGaN/GaN 量子阱中子带的 Rashba 自旋劈裂和子带间自旋轨道耦合作用研究\*

李明 张荣<sup>†</sup> 刘斌 傅德颐 赵传阵 谢自力 修向前 郑有料

(江苏省光电信息功能材料重点实验室, 南京大学电子科学与工程学院, 南京微结构国家实验室, 南京 210093)

(2010年7月18日收到; 2011年3月29日收到修改稿)

首先把本征值方程投影到导带的子空间中, 进而得到 AlGaN/GaN 量子阱中第一、二子带的 Rashba 自旋劈裂系数 ( $\alpha_1, \alpha_2$ ) 和子带间自旋 - 轨道耦合系数  $\eta_{12}$ . 然后自恰求解薛定谔方程和泊松方程计算了不同栅压的量子阱中的  $\alpha_1, \alpha_2$  和  $\eta_{12}$ , 并分别讨论了量子阱阱层、左右异质结界面和垒层对它们的贡献. 结果表明可以通过栅压来调节自旋 - 轨道耦合系数, 子带间自旋轨道耦合系数  $\eta_{12}$  比 Rashba 自旋劈裂系数  $\alpha_1, \alpha_2$  小, 但基本在同一数量级.

**关键词:** Rashba 自旋劈裂, 子带间自旋轨道耦合, 自恰计算, 二维电子气

**PACS:** 71.70.Ej, 73.21.-b, 77.65.Ly

## 1 引言

由于半导体中存在自旋轨道耦合作用, 可以通过控制电荷的轨道运动来操控电子自旋的产生和输运, 从而实现和利用自旋电子学器件 [1–6]. 异质结和量子阱结构材料被认为是自旋电子学器件的平台, 因为它们为光电器件提供了附加的自旋输运功能 [4]. 在晶体势不具备反演对称性的晶体里, 自旋轨道耦合作用消除了零磁场下的电子或空穴的能带的自旋简并, 这将导致能带的自旋劈裂 [7,8]. 晶体势反演不对称性对零场自旋劈裂的贡献主要来自两方面: 体反演不对称性 (BIA) 导致的 Dresselhaus 项 [9] 和结构反演不对称性 (SIA) 导致的 Rashba 项 [10]. 这些自旋轨道耦合作用在半导体自旋电子学中起到很重要的作用, 可以解释很多物理现象和设计半导体自旋电子学器件 [1,11–17]. 早期的工作表明在具有非对称势的体系里, Rashba

自旋劈裂与电场强度直接相关 [18–20]. 近期, Esmerindo Bernardes 等人研究了 GaInAs/GaInAs 量子阱中两个子带间的自旋 - 轨道耦合作用, 起源于量子阱中的两个不同宇称的束缚子带的带间耦合, 即使在对称的量子阱中, 这个新的自旋 - 轨道耦合作用也不为零, 在研究的参数范围内, 强度和 Rashba 自旋劈裂基本可比 [21–23].

假设  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{N}$  层在 Ga(Al)- 面 GaN(纤锌矿结构) 上沿 (0001) ( $c$  轴) 外延生长. 虽然 GaN 带隙较大, 但是由于 III 族氮化物异质结中存在自发极化和压电极化, 内部有很强的电场, 而 Rashba 自旋劈裂和子带间的自旋 - 轨道耦合的强度与电场强度相关, 故即使无外加电压, 也有可观的自旋轨道耦合效应. 极化电场影响了量子阱结构的对称性, 通过调节栅压可以进一步调制量子阱结构的对称性.

在本文中, 我们考虑具有两个束缚子带的 AlGaN/GaN 量子阱结构, 计算了第一二子带

<sup>†</sup> E-mail: rzhang@nju.edu.cn

© 2012 中国物理学会 Chinese Physical Society

<http://wulixb.iphy.ac.cn>

\* 国家自然科学基金(批准号: 60990311, 60721063, 60906025, 60936004), 国家重点基础研究发展计划(批准号: 2011CB301900), 国家高技术研究发展计划(批准号: 2009AA03A198), 江苏省自然科学基金(批准号: BK2008019, BK2009255, BK2010178) 和南京大学扬州光电研究院研发基金资助的课题.

<sup>†</sup> E-mail: rzhang@nju.edu.cn

© 2012 中国物理学会 Chinese Physical Society

<http://wulixb.iphy.ac.cn>

的 Rashba 自旋劈裂系数  $\alpha_1, \alpha_2$  和子带间自旋轨道耦合效应  $\eta_{12}$  随栅压的变化关系。首先，我们利用  $K \cdot P$  方法，基于描述  $\Gamma$  点附近的 s 型导带和 p 型价带的  $8 \times 8$  Kane 模型，消掉空穴的波函数，把本征值方程投影到导带的子空间中，得到  $2 \times 2$  的只含导带波函数的有效质量方程，进而得到有两个束缚子带的 AlGaN/GaN 量子阱的 Rashba 自旋劈裂和子带间的自旋 - 轨道耦合系数的表达式。然后我们自恰求解薛定谔方程和泊松方程，得到导带边的形状，同时可以求出量子阱中所有的束缚态，进而

计算第一、二子带的 Rashba 自旋劈裂和子带间的自旋 - 轨道耦合系数。我们研究了自旋 - 轨道耦合系数随栅压的变化关系，并定量分析了影响自旋 - 轨道耦合系数的各方面因素。最后给出了结论。

## 2 理论模型和方法

包含导带、重空穴带、轻空穴带和晶体场劈裂带的  $8 \times 8$  的哈密顿可以写成<sup>[24]</sup>

$$H_{8 \times 8} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \begin{bmatrix} E_C & \frac{-P_2 k_+}{\sqrt{2}} & \frac{-P_2 k_-}{\sqrt{2}} & P_1 k_z & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{-P_2 k_-}{\sqrt{2}} & E_v + \Delta_1 + \Delta_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{P_2 k_+}{\sqrt{2}} & 0 & E_v + \Delta_1 - \Delta_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{2}\Delta_3 \\ P_1 k_z & 0 & 0 & E_v & 0 & 0 & \sqrt{2}\Delta_3 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{-P_2 k_y}{\sqrt{2}} & 0 & E_C & \frac{P_2 k_-}{\sqrt{2}} & \frac{-P_2 k_+}{\sqrt{2}} & P_1 k_z \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{P_2 k_+}{\sqrt{2}} & E_v + \Delta_1 + \Delta_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{2}\Delta_3 & \frac{-P_2 k_-}{\sqrt{2}} & 0 & E_v + \Delta_1 - \Delta_2 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2}\Delta_3 & 0 & P_1 k_z & 0 & 0 & E_v \end{bmatrix} \quad (1)$$

$P_1$  和  $P_2$  是带间动量矩阵元， $P_1 = P_2 = \hbar\sqrt{E/2m_0}$ ,  $E = 20\text{meV}$ <sup>[4]</sup>。 $\Delta_1$  是晶体场劈裂能， $\Delta_{2,3}$  是自旋轨道耦合作用参数。我们假设导带边带阶  $\Delta E_C$  为 950 meV。本征值方程写为  $H_{8 \times 8}[f] = \varepsilon[f]$ ，本征函数  $[\tilde{f}] = f_1 f_2 f_3 f_4 f_5 f_6 f_7 f_8$ 。消掉空穴的包络函数，把本征值方程投影到导带的子空间中（含两个自旋子带），得到  $2 \times 2$  的只含导带波函数的有效质量方程

$$\begin{pmatrix} -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left( \frac{1}{m(z)} \frac{d}{dz} \right) + V(z) + \frac{\hbar^2 k_t^2}{2m_t + E_c - \varepsilon} & -\eta(z)ik_- \\ \eta(z)ik_+ & -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left( \frac{1}{m(z)} \frac{d}{dz} \right) + V(z) + \frac{\hbar^2 k_t^2}{2m_t} + E_c - \varepsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1 \\ f_5 \end{pmatrix} = 0, \quad (2)$$

其中自旋轨道耦合系数  $\eta(z)$  可以写成<sup>[4,25-28]</sup>

$$\eta(z) = -P_1 P_2 \frac{\partial \beta}{\partial z} = -P_1 P_2 \frac{\partial}{\partial z} \times \left[ \frac{\Delta_3}{(E_v - \varepsilon)(E_v - \varepsilon + \Delta_1 - \Delta_2) - 2\Delta_3^2} \right], \quad (3)$$

$$\beta = \frac{\Delta_3}{(E_v - \varepsilon)(E_v - \varepsilon + \Delta_1 - \Delta_2) - 2\Delta_3^2}. \quad (4)$$

我们从方程 (2) 可以看出，自旋轨道耦合效应体现在非对角项中，因而我们可以先联立求解薛

定谔方程和泊松方程，得到导带边的形状，同时可以求出所有的束缚态和电子的分布，然后再由方程 (3) 确定自旋轨道耦合系数  $\eta(z)$ 。薛定谔方程中的  $V(z)$  是哈特里静电势， $m(z)$  是  $z$  轴方向的有效质量。 $m_t$  和  $k_t$  是面内的有效质量和波矢。 $E_c^0$  和  $E_v^0$  分别是  $\Gamma$  点的导带边和最高价带边。

利用有限差分法自恰求解薛定谔方程和泊松方程<sup>[29]</sup>，求出第  $n$  个导带子带边能量  $\varepsilon_n$  和波函数  $\phi_n$ 。我们考虑量子阱中的有两个束缚子带的情况，并考虑到自旋，选取如下四个基矢波函数，

$|k_t v, \pm\rangle, v = 1, 2$ , 则有下面的矩阵元:

$$\begin{aligned} \langle k_t v, \pm | H | k_t v', \pm \rangle &= (\frac{\hbar^2 k_t^2}{2m_t} + \varepsilon_v) \delta_{vv'}, \\ \langle k_t v, \pm | H | k_t v', \mp \rangle &= \mp i \eta_{vv'} k_{\mp}, \quad (5) \\ \eta_{vv'} &= \langle v | \eta(z) | v' \rangle = \int \phi_v(z) \eta(z) \phi_{v'}(z) dz \\ &= -P_1 P_2 [\phi_v(0) \phi_{v'}(0) (\beta_W - \beta_L) \\ &\quad - \phi_v(L) \phi_{v'}(L) (\beta_W - \beta_L) \\ &\quad + \langle v | B_L F_L | v' \rangle_L + \langle v | B_W F_W | v' \rangle_W \\ &\quad + \langle v | B_R F_R | v' \rangle_R], \quad (6) \\ B_i &= \frac{\Delta_3 [2E_g + \Delta_1 + 3\Delta_2 + 2(\varepsilon - V)]}{\{(E_v - \varepsilon)(E_v - \varepsilon + \Delta_1 - \Delta_2) - 2\Delta_3^2\}^2}. \quad (7) \end{aligned}$$

此时, 考虑到电子的自旋, 含有两个束缚子带的量子阱的导带电子的有效哈密顿可以写成

$$H = \begin{pmatrix} \varepsilon_{k_t,1} & -i\alpha_1 k_- & 0 & -i\eta k_- \\ i\alpha_1 k_+ & \varepsilon_{k_t,1} & i\eta k_+ & 0 \\ 0 & -i\eta k_- & \varepsilon_{k_t,2} & -i\alpha_2 k_- \\ i\eta k_+ & 0 & i\alpha_2 k_+ & \varepsilon_{k_t,2} \end{pmatrix}. \quad (8)$$

第一子带的 Rashba 自旋劈裂系数  $\alpha_1 = \eta_{11}$ , 第二子带的 Rashba 自旋劈裂系数  $\alpha_2 = \eta_{22}$ , 子带间自旋轨道耦合系数:  $\eta_{12}$ . 然后利用方程 (6) 可以计算 Al<sub>0.5</sub> Ga<sub>0.5</sub> N/GaN 量子阱中的第一、二子带的自旋劈裂系数、两个子带间的自旋轨道耦合系数随栅压的变化关系.

表 1 Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>N/GaN 量子阱的物理参数

c 轴方向的有效质量 $m_0$	$m(z) = 0.22 + 0.26x$
静态介电常数 $\varepsilon_0$	$\varepsilon_r = 10.4 - 0.3x$
晶体场劈裂能/meV	$\Delta_2 = \Delta_3 = 6.0^{[30]}$
自旋轨道劈裂能/meV	$\Delta_1 = 22 - 80x^{[31]}$

### 3 结果与分析

我们计算了 AlGaN/GaN/AlGaN 量子阱自旋-轨道耦合系数随栅压的变化关系, 并定量分析了来自阱层, 垒层, 和左右两个异质结界面的贡献. 表 1 给出了我们计算所用的材料参数. 图 1 给出了栅压为 0.5 V 时的 AlGaN/GaN 量子阱的导带边形状, 第一、二束缚态能级和波函数. 我们看出, 由于存在极化电场和栅压, 导致量子阱的结构不对称, 从而电子的分布也不对称, 将导致可观的 Rashba 自旋劈裂系数, 并且对子带间自旋轨道耦合系数也将有

重要影响.

我们发现, 如果所加的栅压不断增加时, 部分电子将会溢出量子阱结构, 特别是电压超过一定范围时, 量子阱中的第二束缚态将不存在, 我们的模型就不再适用了. 因此, 存在一个电压范围, 在这个范围内, 量子阱中将有两个束缚态存在. 从计算结果可以看出, 这个偏压范围大概在 -1—0.8 V 内.

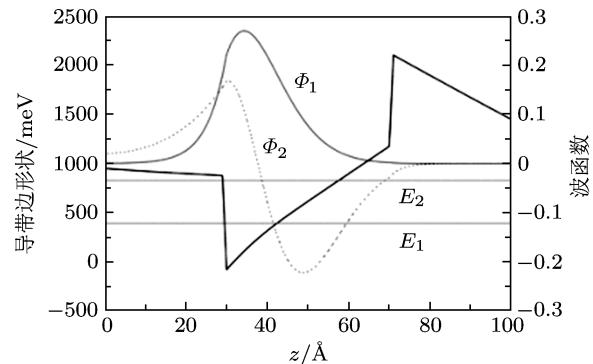


图 1 AlGaN/GaN 量子阱导带带边图, 第一二子带的带边能量和波函数

此外, 为了便于分析和讨论下面计算的结果, 图 2 我们给出了第一二子带的电子的位置的平均值随栅压的变化关系. 第  $n$  个子带的电子的位置的平均值可以写成:  $\langle z \rangle_n = \int_0^L z \phi_n^2(z) dz$ . 其中,  $L$  是整个单量子阱的厚度 (包括垒层和阱层), 坐标原点选在量子阱的最左端 (如图 1). 从图 2 可以看出: 第一二子带的电子的位置的平均值随栅压增加不断向量子阱的左侧移动, 说明电子的波函数的峰向左侧移动. 主要是由于随着栅压增加, 量子阱右侧的垒层的电势能不断升高, 也就是量子阱右侧的电子的势垒不断升高.

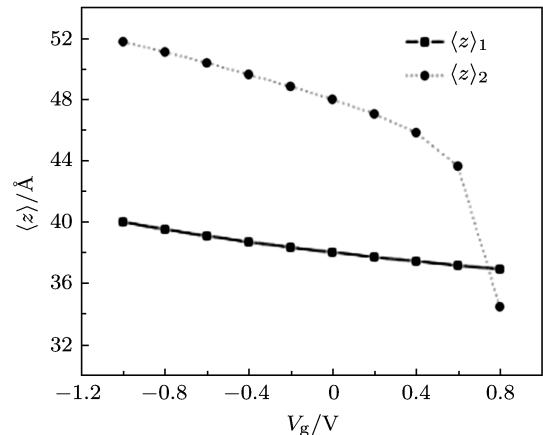


图 2 第一二子带的电子的位置的平均值随栅压的变化关系

图 3 给出了第一二子带的 Rashba 自旋劈裂系

数  $\alpha_1, \alpha_2$ , 和子带间自旋轨道耦合系数  $\eta_{12}$  随栅压的变化关系. 我们可以看出: 和  $\alpha_1, \alpha_2$  相比,  $\eta_{12}$  的强度较小, 但基本在同一数量级. 栅压在  $-1\text{--}0.8\text{ V}$  内,  $\alpha_1$  的绝对值随栅压增加而增加;  $\alpha_2$  的绝对值先随栅压增加而增加, 在  $0.5\text{--}0.8\text{ V}$  间迅速减小;  $\eta_{12}$  的绝对值整体上随栅压缓慢地减小. 具体原因将在下面详细讨论.

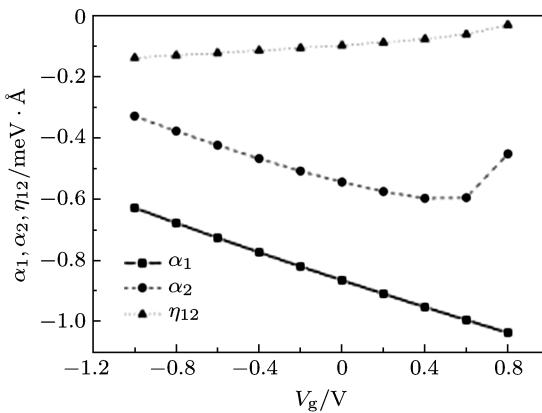


图 3 量子阱中的第一二子带的 Rashba 自旋劈裂, 子带间自旋轨道耦合系数随栅压的变化

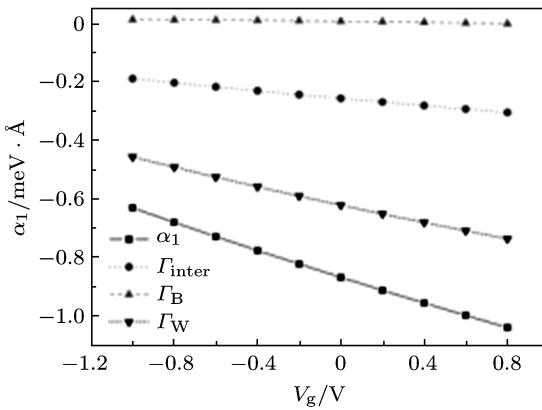


图 4 量子阱中的第一子带的 Rashba 自旋劈裂系数以及各部分对其的贡献随栅压的变化

图 4 给出了第一子带的 Rashba 自旋劈裂系数  $\alpha_1$  以及左右异质结界面 ( $\Gamma_{\text{inter}}$ ), 垒层 ( $\Gamma_B$ ), 阵层 ( $\Gamma_W$ ) 对其贡献随栅压的变化关系. 我们可以看出阵层的贡献最大, 异质结界面次之, 而垒层的贡献很小. 根据方程 (6), 垒层 ( $\Gamma_B$ ), 阵层 ( $\Gamma_W$ ) 对  $\alpha_1$  的贡献取决于相应区域的电场强度和第一子带的波函数, 随着栅压的增加, 第一子带的波函数的峰向量子阱左侧异质结界面稍有移动, 同时垒层和阵层的电场强度都不断增加, 且量子阱层左侧的电场强度大于右侧, 所以阵层和异质结界面的贡献随之增加. 而由于占据第一子带的电子在垒层的概率很

小, 即使垒层的电场强度稍微有所增加, 垒层的贡献  $\Gamma_B$  随栅压变化不明显. 此外, 随着第一子带的波函数的峰向量子阱左侧异质结界面移动,  $\Gamma_{\text{inter}}$  随栅压不断增加, 因为量子阱界面的贡献正比于界面处的波函数的平方.

图 5 给出了第二子带的 Rashba 自旋劈裂系数  $\alpha_2$  以及异质结界面 ( $\Gamma_{\text{inter}}$ ), 垒层 ( $\Gamma_B$ ), 阵层 ( $\Gamma_W$ ) 对其的贡献随栅压的变化关系. 我们可以看出阱层的贡献最大, 异质结界面次之, 而垒层的贡献很小. 但是同  $\alpha_1$  的情况有所不同: 电压在  $-1\text{--}0.4\text{ V}$  间,  $\alpha_2$  的绝对值不断增加,  $0.6\text{--}0.8\text{ V}$  间迅速减小. 根据方程 (6), 垒层 ( $\Gamma_B$ ), 阵层 ( $\Gamma_W$ ) 对  $\alpha_2$  的贡献取决于相应区域的电场强度和第二子带的波函数. 随着栅压的增加, 第二子带的波函数的峰稍微向量子阱左侧异质结界面移动, 另外垒层和阱层的电场强度都不断增加, 所以阱层和异质结界面的贡献随之增加, 而由于占据第二子带的电子在垒层的概率很小, 即使电场稍微有所增加, 垒层的贡献  $\Gamma_B$  随栅压变化不明显. 当所加的栅压超过  $0.6\text{ V}$  时, 异质结界面 ( $\Gamma_{\text{inter}}$ ), 阵层 ( $\Gamma_W$ ) 的贡献都突然减小, 主要是由于量子阱的束缚能力降低, 第二子带的波函数的峰继续向量子阱左侧异质结界面移动且峰的强度不断减小, 所以左侧的峰跨过左侧异质结界面后, 左侧异质结界面处和界面右侧的阱层中的波函数的数值迅速减小, 也就是阱层的概率密度将减小, 从而导致异质结界面和阱层的贡献不断减小, 即使量子阱中的电场随栅压增加.

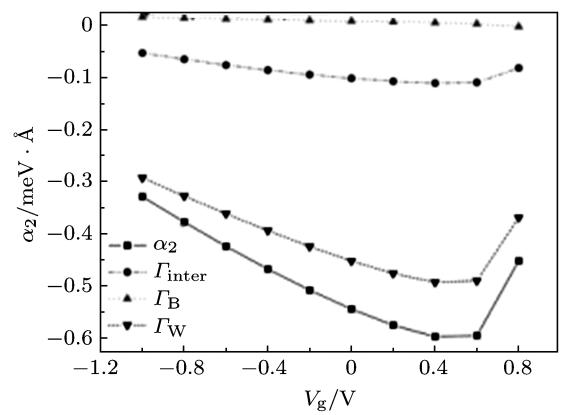


图 5 量子阱中的第二子带的 Rashba 自旋劈裂系数以及各部分对其的贡献随栅压的变化

图 6 给出了  $\eta_{12}$  以及界面 ( $\Gamma_{\text{inter}}$ ), 垒层 ( $\Gamma_B$ ), 阵层 ( $\Gamma_W$ ) 对其的贡献随栅压的变化关系. 我们可以看出异质结界面的贡献最大, 阵层次之, 但在很大的电压范围内与异质结界面的贡献的符号相反,

而垒层的贡献很小。我们可以看出，电压在  $-1$ — $0.8$  V 的范围内， $\eta_{12}$  的绝对值随电压不断减小，这是因为整个量子阱结构是非对称的结构，导致电子的非对称分布，阱层贡献的数值先随栅压增加不断变小，在栅压为  $-0.6$  V 时阱层的贡献减小到零然后就改变了符号且不断增加，与异质结界面的贡献相反，这主要是由于第二子带的波函数的波峰、波谷不断向量子阱结构的左侧移动，与第一个子带的波函数的乘积在阱层的中间的一部分区域为正值，一部分区域为负值，在栅压大约为  $-0.6$  V 时，刚好抵消。栅压继续增加时，阱层的贡献改变符号且不断增加，因为阱层的电场随栅压不断增加。当所加的栅压超过  $0.6$  V 时，由于量子阱的束缚能力进一步降低，第二子带的波函数的波峰继续向量子阱左侧异质结界面移动且波峰的强度不断减小，所以波峰跨过左侧异质结界面后，左侧异质结界面处和界面右侧的阱层中的波函数数值迅速减小，更多的区域的波函数由正值变为负值，导致两个波函数的乘积在阱层的中间的很大一部分区域为负值。从而使异质结界面的贡献逐步减小，阱层的贡献改变符号且不断增加。阱层的贡献抵消了异质结界面的贡献，使  $\eta_{12}$  的绝对值整体上随栅压增加而减小。

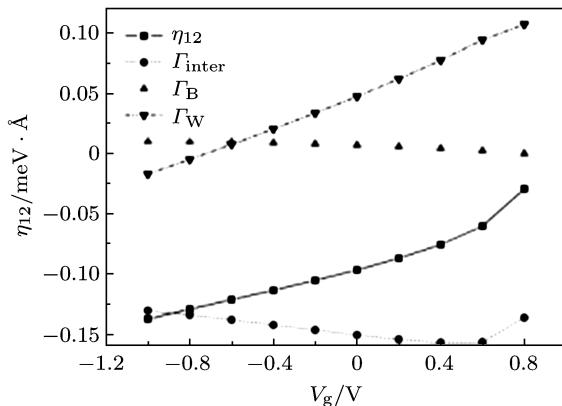


图 6 量子阱中的子带间自旋轨道耦合系数以及各部分对其的贡献随栅压的变化

实验上 AlGaN/GaN 异质结中的自旋劈裂报道的数值范围是  $0.1$  到  $9$  meV<sup>[6,32–34]</sup>，这里计算的自旋劈裂的强度和其他的 III-V 族材料基本在同一数量级，例如 InAlAs/InGaAs 量子阱中的  $1$  meV<sup>[35]</sup>。另外总自旋劈裂包括 Dresselhaus 和 Rashba 项共同

的贡献，这里只考虑了 Rashba 项，因为它直接取决于内建电场。

与 AlInAs/GaInAs 量子阱中的自旋-轨道耦合系数相比，我们这里计算的结果大约小了两个数量级，主要原因是 GaN 带隙 ( $3.44$  eV) 比 GaInAs ( $0.816$  eV) 大得多，而根据方程 (3), (4), (7),  $E_g$  是最大的能量标度，自旋-轨道耦合系数近似正比于  $E_g^{(-n)}$  ( $2 < n < 4$ )

## 4 结 论

通过消掉空穴的波函数，把本征值方程投影到导带的子空间中，得到  $2 \times 2$  的只含导带波函数的有效质量方程，并应用到 AlGaN/GaN 量子阱中，得到 Rashba 自旋劈裂系数和子带间的自旋-轨道耦合系数的表达式。考虑到压电极化和自发极化效应，我们自洽求解薛定谔方程和泊松方程，得到导带边的形状，同时求出所有的束缚态，进而我们研究了第一、二子带的 Rashba 自旋劈裂系数  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$  和子带间自旋轨道耦合系数  $\eta_{12}$ 。我们发现，栅压在  $-1$ — $0.8$  V 内， $\alpha_1$  的绝对值随偏压增加而增加， $\alpha_2$  的绝对值先随偏压增加而增加，到  $0.5$  V 后迅速减小， $\eta_{12}$  整体上随栅压缓慢地减小。自旋轨道耦合参数包括阱层、异质结界面和垒层的贡献。阱层和异质结界面对自旋轨道耦合参数的贡献较大而垒层的贡献很小。阱层和异质结界面对  $\alpha_1$  的贡献随栅压增加，对  $\alpha_2$  的贡献随栅压先增加后减小。异质结界面对  $\eta_{12}$  的贡献随栅压先增加后减小，异质结界面对  $\eta_{12}$  的贡献先随电压很快减小到零，然后改变符号，反向增加。计算的子带间自旋轨道耦合效应  $\eta_{12}$  和第一、二子带的 Rashba 自旋劈裂系数  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$  大小在同一数量级。栅压在  $-1$ — $0.8$  V 内， $\alpha_1$  的绝对值随栅压增加而增加， $\alpha_2$  的绝对值先随栅压增加而增加，到  $0.5$  后迅速减小， $\eta_{12}$  整体上随栅压缓慢地减小。

总之，可以通过栅压来调节自旋-轨道耦合系数，特别是第一二子带的 Rashba 自旋劈裂系数  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$ 。此外，由于 GaN 带隙较大，AlGaN/GaN 量子阱的自旋-轨道耦合系数比 AlInAs/GaInAs 量子阱大约小了两个数量级。

- [1] Zutic I, fabian J, Das Sarma S 2004 *Rev. Mod. Phys.* **76** 323
- [2] Ikai Lo, Gau M H, Tsai J K, Chen Y L, Chang Z J, Wang W T, Chiang J C, Aggerstam T, Lourdudoss S 2007 *Phys. Rev. B* **75** 245307
- [3] He X W, Shen B, Tang Y Q, Tang N, Yin C M, Xu F J, Yang Z J, Zhang G y, Chen Y H, Tang C G, Wang Z G 2007 *Appl. Phys. Lett.* **91** 071912
- [4] Litvinov V I 2003 *Phys. Rev. B* **68** 155314
- [5] Pfeffer P, Zawadzki W 1999 *Phys. Rev. B* **59** 5312
- [6] Weber W, Ganichev S D, Danilov S N, Weiss D, Prettl W, Kvon N D, Bel'kov V V Golub L E, Cho H I, Lee J H 2005 *Appl. Phys. Lett.* **87** 262106
- [7] Ganichev S D, Bel'kov V V, Golub L E, Ivchenko E L, Schneider P, Giglberger S, Eroms J, De Boeck J, Borghs G, Wegscheider W, Weiss D, Prettl W 2004 *Phys. Rev. Lett.* **92**, 256601
- [8] Chao Z J, Gui Y S, Shu X Z, Dai N, Guo S L, Chu J H 2004 *Acta Phys. Sin.* **53** 1186 (in Chinese) [仇志军, 桂永胜, 疏小舟, 戴宁, 郭少令, 褚君浩 2004 物理学报 **53** 1186]
- [9] Dresselhaus G 1955 *Phys. Rev.* **100** 580
- [10] Bychkov Y A, Rashba E I 1984 *J. Phys. C* **17** 6039
- [11] Sun H Z, Zhang P, Duang S Q, Zhao X G 2006 *Chin. Phys.* **15** 3019
- [12] Yan Y Z, Hu L B 2010 *Chin. Phys. B* **19** 047203
- [13] Li Y G, Li B Z 2005 *Chin. Phys.* **14** 1021
- [14] Wolf S A, Awschalom D D, Buhrman R A, Daughton J M, von Molnár S, Roukes M L, Chtchelkanova A Y, Treger D M 2001 *Science* **294** 1488
- [15] Awschalom D, Loss D, Samarth N 2002 *Semiconductor Spintronics and Quantum Computation* (Berlin Springer) p1–3
- [16] Wang X H, An X T, Liu J J 2009 *Chin. Phys. B* **18** 749
- [17] Sheng W, Wang Y, Zhuo G H 2007 *Chin. Phys.* **16** 533
- [18] Tang N, Shen B, Zheng Z W, Liu J, Chen D J, Lu J, Zhang R, Shi Y, Zheng Y D, Gui Y S, Jiang C P, Qiu Z J, Guo S L, Chu J H, Hoshino K, Someya T, Arakawa Y 2003 *J. Appl. Phys.* **94** 5420
- [19] Zheng Z W, Shen B, Jiang C P, Gui Y S, Someya Y, Zhang R, Shi Y, Zheng Y D, Guo S L, Chu J H, Arakawa Y 2003 *J. Appl. Phys.* **93** 1651
- [20] Winkler R 2003 *Spin-Orbit coupling effects in two-dimensional electron and hole systems* (Berlin Springer) p77–86
- [21] Calsaverini R S, John Schliemann, Esmerindo Bernardes, Carlos Egues J, Daniel Loss 2008 *Phys. Rev. B* **78** 155313
- [22] Esmerindo Bernardes, Calsaverini R S, Esmerindo Bernardes, Carlos Egues J, Daniel Loss 2007 *Phys. Rev. Lett.* **99** 076603
- [23] Jaroslav Fabian, Alex Matos-Abiaguea, Christian Ertlera, Peter Stano, Igor Žutić 2007 *Acta Physica Slovaca* **57** 565
- [24] Chuang S L, Chang C S 1996 *Phys. Rev. B* **54** 2491
- [25] Litvinov V I 2006 *Appl. Phys. Lett.* **89** 222108
- [26] Li M, Zhang R, Zhang Z, Yan Y S, Liu B, Fu D, Zhao C J, Xie Z L, Xiu X Q, Zheng Y D 2010 *Superlattice and Microstructure* **47** 522
- [27] Li M, Zhang R, Zhang Z, Yan W S, Liu B, Fu D, Zhao C Z, Xie Z L, Xiu X Q, Zheng Y D May 2009 13<sup>th</sup> International Workshop on Computational Electronics p230–233
- [28] Li M, Zhang R, Zhang Z, Liu B, Fu D Y, Zhao C Z, Xie Z L, Xiu X Q, Zheng Y D 2011 *Phys. Status Solidi B* **248** 187
- [29] Tan I H, Snider G L, Chang L D, Hu E L 1990 *J. Appl. Phys.* **68** 4071
- [30] Kumagai M, Chuang S L, Ando H 1998 *Phys. Rev. B* **57** 15303
- [31] Suzuki M, Uenoyama T, Yanase A 1995 *Phys. Rev. B* **52** 8132
- [32] Ikai Lo, Tsai J K, Yao W J, Ho P C, Tu L W, Chang T C, Elhamri S, Mitchel W C, Hsieh K Y, Huang J H, Huang H L, Tsai W C 2002 *Phys. Rev. B* **65** R161306
- [33] Tsubaki, Maeda N, Saitoh T, Kobayashi N 2002 *Appl. Phys. Lett.* **80** 3126
- [34] Schmult, Manfra M J, Punnoose A, Sergent A M, Baldwin K W, Molnar R J 2006 *Phys. Rev. B* **74** 033302
- [35] Koga T, Nitta J, Akazaki T, Takayanagi H 2002 *Phys. Rev. Lett.* **89** 046801

# Study of Rashba spin splitting and intersubband spin-orbit coupling effect in AlGaN/GaN quantum wells\*

Li Ming Zhang Rong<sup>†</sup> Liu Bin Fu De-Yi Zhao Chuan-Zhen Xie Zhi-Li  
Xiu Xiang-Qian Zheng You-Dou

(Jiangsu Provincial Key Laboratory of Advanced Photonic and Electronic Materials, School of Electronic Science and Engineering, Nanjing University, Nanjing National Lab of Microstructures, Nanjing 210093, China)

(Received 18 July 2010; revised manuscript received 29 March 2011)

## Abstract

Rashba spin splitting coefficients for the first two subbands  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$  and intersubband spin-orbit coupling coefficient  $\eta_{12}$  are obtained by projecting the characteristic equation into the subspace of conduction band. Then Schrödinger and the Poisson equations are solved self-consistently to calculate  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$  and  $\eta_{12}$  under different gate voltages. Then contributions to the spin-orbit coupling coefficients from the well, the left and the right heterointerfaces and the left and the right barriers of the quantum well are discussed. Results show that the spin-orbit coupling coefficient can be modulated by the gate voltage, and the intersubband spin-orbit coupling coefficients calculated here are a little smaller than the Rashba coefficients  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$ , but they are basically of the same order.

**Keywords:** Rashba spin splitting, intersubband spin-orbit coupling, self-consistent calculation, two dimensional electron gas

**PACS:** 71.70.Ej, 73.21.-b, 77.65.Ly

\* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 60990311, 60721063, 60906025, 60936004), the State Key Development Program for Basic Research of China (Grant No. 2011CB301900), the State Development Program for Research on Advanced technology of China (Grant No. 2009AA03A198), the Natural Science Foundation of Jiangsu Province (Grant Nos. BK2008019, BK2009255, BK2010178), and the Research Foundation for School of Yangzhou Photonic and Electronic research of Nanjing University.

† E-mail: rzhang@nju.edu.cn