第 57 卷 第 12 期 2008 年 12 月
1000-3290/2008/57(12)/7865-07

物 理 学 报
ACTA PHYSICA SINICA

Vol.57,No.12,December,2008
©2008 Chin. Phys. Soc.

PbTe/PbSrTe 半导体非对称量子阱中的 Rashba 效应*

徐天宁[1)2)] 吴惠桢[1)†] 隋成华[2)]

1)(浙江大学物理系,杭州 310027)

2)(浙江工业大学之江学院理学系,杭州 310024)

(2008 年 3 月 29 日收到;2008 年 8 月 6 日收到修改稿)

窄带隙半导体异质结构的自旋效应最近受到了国际上的很大关注.Ⅳ-Ⅵ族半导体具有各向异性和多能谷的特征,因此可以预期 Rashba 自旋效应在不同取向的Ⅳ-Ⅵ族半导体量子阱结构中存在显著差异.计算了多个取向的 $Pb_{1-y}Sr_yTe/PbTe/Pb_{1-x}Sr_xTe$ 非对称量子阱中的 Rashba 分裂能,结果表明[100]取向的 PbTe 量子阱的 Rashba 分裂能在阱宽为 5.0 nm 时高达 2.2 meV,而沿其他两个主要方向([110],[111])生长的量子阱由于能谷的退简并存在两组 Rashba 分裂能.给出了 Rashba 自旋分裂能与量子阱非对称参量、阱宽、温度和波矢 $k_{//}$ 的依赖关系.Ⅳ-Ⅵ族半导体非对称量子阱结构比Ⅲ-Ⅴ族半导体具有更大的 Rashba 自旋分裂能,这一特点使得它在自旋电子器件领域可能具有潜在的应用价值.

关键词:Ⅳ-Ⅵ族半导体,非对称量子阱,Rashba 效应,自旋-轨道耦合分裂

PACC:7320D,7850G

1. 引 言

近年来,人们对利用半导体纳米结构中的自旋-轨道耦合效应,尤其是利用 Rashba 效应实现对电子自旋的操控表现出很大的兴趣[1—6].随着半导体能带工程(band-gap engineering)技术的日益成熟,在非磁性半导体结构中利用自旋-轨道相互作用实现自旋操控成为可能.理论上已经有报道Ⅲ-Ⅴ族非磁场调控异质结的自旋分离效应[7,8].在这些结构中,平面内的导带电子态是非自旋简并的,即相同 $k_{//}$ 值不同自旋的电子能量分裂,并可由与 $k_{//}$ 相关的有效磁场来描述.该有效磁场决定了纳米结构的自旋依赖特性[9].虽然实验上利用非磁性半导体结构实现自旋电子器件还存在困难,但从理论上进一步研究新结构体系和新材料体系中的 Rashba 效应对理解自旋器件相关的物理特性是有益的.

量子阱中电子受到的自旋-轨道耦合效应与量子阱结构的对称性有关.在Ⅲ-Ⅴ族非对称量子阱中,自旋-轨道耦合分裂来自以下两个方面:一个是由于体材料反演非对称性(bulk inversion asymmetry)产生的 k^3 项,称为 Dresselhaus 项[10];另一个是由于量子阱结构反演非对称(structure inversion asymmetry),即 Rashba 项[11,12].在 GaAs/GaAlAs 量子阱中,这两项数值上相近,而在窄带隙半导体(如 InAs)中 Rashba 项占主导作用[1].

尽管人们已对Ⅲ-Ⅴ族半导体量子阱中的自旋-轨道耦合进行了大量的研究,但是对具有各向异性多能谷结构的Ⅳ-Ⅵ族窄带隙半导体量子阱中的 Rashba 效应却未受到人们的广泛关注.在Ⅳ-Ⅵ族半导体非对称量子阱中,由于该材料体系具有反演对称性,电子的自旋-轨道耦合相互作用则完全是由 Rashba 效应引起的.Hasegawa 等[9]虽然给出了[111]取向的 $Pb_{1-x}Eu_xTe/PbTe/Pb_{1-y}Eu_yTe$ 量子阱中的 Rashba 自旋-轨道耦合分裂能,但他们没有研究生长取向与 Rashba 自旋-轨道耦合分裂能的依赖关系.对于具有各向异性的多能谷结构的Ⅳ-Ⅵ族材料而言,生长取向对量子阱中的电子能带结构的影响是

* 国家自然科学基金(批准号:10434090)和教育部博士点基金(批准号 20060335035)资助的课题.

† 通讯联系人. E-mail:hzwu@zju.edu.cn

重要的.同时,[111]取向的 $Pb_{1-x}Eu_xTe/PbTe/Pb_{1-y}Eu_yTe$量子阱的垒层材料 PbEuTe 中的 Eu^{2+} 本身带有磁性,他们也没有考虑 PbEuTe 中的 Eu^{2+} 的磁性对 Rashba 分裂能的影响,使得计算结果的可靠性和对实验的预见性降低.因此有必要排除磁性势垒材料的影响,对Ⅳ-Ⅵ族非对称量子阱中的 Rashba 效应进行系统地研究.

本文选择Ⅳ-Ⅵ族窄带隙半导体量子阱结构,根据 $k\cdot p$四带包络波函数理论[13],计算了非磁性材料 PbSrTe为势垒的Ⅳ-Ⅵ族 PbTe 非对称量子阱($Pb_{1-y}Sr_yTe/PbTe/Pb_{1-x}Sr_xTe$)中的 Rashba 自旋-轨道耦合分裂能,讨论了 Rashba 自旋-轨道耦合分裂能与量子阱生长取向、非对称性和阱宽等的依赖关系.这对将来的实验研究具有指导意义.

2. 理 论

对于不同生长取向的Ⅳ-Ⅵ族半导体量子阱中不同能谷的电子能量和相应波函数,都可以通过下列类 Schröndinger 方程进行计算:

$$\left[\left(-\frac{\hbar^2}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z'}\frac{1}{m_z}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z'}+\frac{\hbar^2k_x^2}{2m_x}+\frac{\hbar^2k_y^2}{2m_y}+\frac{E_g}{2}+\mathrm{H}(z)\right)\times I+\boldsymbol{\alpha}_{so}\cdot\boldsymbol{\sigma}'\times\boldsymbol{k}_{/\!/}+o(k_i^4)\right]f_c=E_cf_c, \tag{1}$$

式中 E_g 为带隙,$\mathrm{H}(z)$是用来表征沿生长方向的禁带中心变化的阶跃函数,I 是 2×2 单位矩阵,$\boldsymbol{\alpha}_{so}\cdot\boldsymbol{\sigma}'\times\boldsymbol{k}_{/\!/}$是 Rashba 自旋-轨道耦合项,$\boldsymbol{k}_{/\!/}=\boldsymbol{k}_x+\boldsymbol{k}_y$,$o(k_i^4)$是 k_i($i=x,y,z$)的高阶小量,可以用微扰理论进行求解.为研究方便,在 $Pb_{1-y}Sr_yTe/PbTe/Pb_{1-x}Sr_xTe$非对称量子阱中,我们只考虑沿 k_x 方向的 Rashba 自旋-轨道耦合分裂.Rashba 项写成有效磁场形式[9]

$$\boldsymbol{\alpha}_{so}\cdot\boldsymbol{\sigma}'\times\boldsymbol{k}_{/\!/}=\alpha_{so}\boldsymbol{B}_{eff}(\boldsymbol{k}_{/\!/})\cdot\boldsymbol{\sigma}, \tag{2}$$

式中

$$\alpha_{so}=\alpha_{so}(z,E)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\beta_{so}, \tag{3a}$$

$$\beta_{so}=\frac{\hbar^2}{m_0^2}P_{/\!/}\,P_{\perp}\frac{1}{E+E_g(z)-V(z)}, \tag{3b}$$

$$\boldsymbol{B}_{eff}(\boldsymbol{k}_{/\!/})=\boldsymbol{k}_{/\!/}\times\hat{z}, \tag{3c}$$

$$V(z)=\begin{cases}E_g^w/2+Q_r(E_g^{br}-E_g^w) & (z>w_z/2),\\ E_g^w/2 & (-w_z/2\leqslant z\leqslant w_z/2),\\ E_g^w/2+Q_l(E_g^{bl}-E_g^w) & (z<-w_z/2).\end{cases} \tag{3d}$$

这里 $\boldsymbol{B}_{eff}(\boldsymbol{k}_{/\!/})$为有效磁场,$E_g^w$,$E_g^l$ 和 E_g^r 分别为阱层材料的带隙、阱层左侧和右侧的势垒材料的带隙,w_z 为势阱宽度,Q_l 和 Q_r 分别为势阱左右两侧的带阶参量.$Pb_{1-y}Sr_yTe/PbTe/Pb_{1-x}Sr_xTe$ 非对称量子阱的能带结构如图 1 所示.

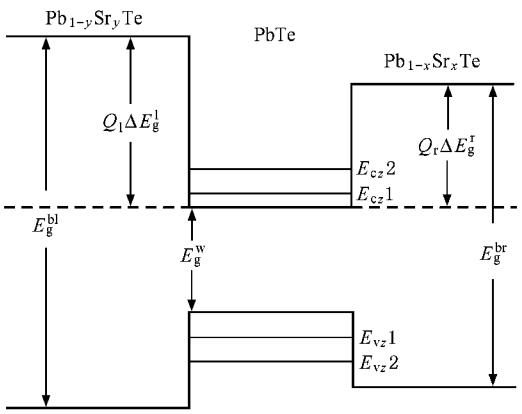


图 1 $Pb_{1-y}Sr_yTe/PbTe/Pb_{1-x}Sr_xTe$ 非对称量子阱的能带结构

$\Delta E_g^{l,r}=E_g^{bl,br}-E_g^w$ 表示阱层材料和左右势垒层的带隙差

经过上述处理后,(1)式可改写为

$$\left[\left(-\frac{\hbar^2}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}\frac{1}{m_z}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}+\frac{\hbar^2k_x^2}{2m_x}+\frac{\hbar^2k_y^2}{2m_y}+V(z)\right)\times I+\alpha_{so}\boldsymbol{B}_{eff}(\boldsymbol{k}_{/\!/})\cdot\boldsymbol{\sigma}+o(k_i^4)\right]f_c=E_cf_c. \tag{4}$$

有效磁场 $\boldsymbol{B}_{eff}(\boldsymbol{k}_{/\!/})$在不同取向量子阱和不同能谷的具体形式如表 1 中所列.Ⅳ-Ⅵ族非对称量子阱中自旋相关的电子能量的求解,需要考虑自旋依赖的边界条件[14] $-\frac{\hbar^2}{2m_z}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}z}f_{\pm}(z)\pm\beta_{so}|\boldsymbol{B}_{eff}|f_{\pm}(z)$ 在边界处连续.因而量子阱中电子的能量可由下式进行求解:

$$\left(\frac{\hbar^2k_w}{2m_z^w}\right)^2-\frac{\hbar^2k_w}{2m_z^w\tan(k_wwz)}\times\left[\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{k_l}{m_z^{bl}}+\frac{k_r}{m_z^{br}}\right)\pm(\beta_{so}^{bl}-\beta_{so}^{br})|\boldsymbol{B}_{eff}|\right]$$

$$= \left(\frac{\hbar^2 k_l}{2m_z^{bl}} \pm (\beta_{so}^{bl} - \beta_{so}^{w}) \mid \boldsymbol{B}_{eff} \mid \right) \times \left(\frac{\hbar^2 k_r}{2m_z^{br}} \mp (\beta_{so}^{br} - \beta_{so}^{w}) \mid \boldsymbol{B}_{eff} \mid \right), \quad (5)$$

式中的‘ ± ’号表示参照有效磁场方向的自旋，当自旋向上时取正，当自旋向下时取负.(5)式中的 k_w，k_l 和 k_r 分别为势阱中和势垒中电子的波矢，具体的形式为

$$k_w = \sqrt{\frac{2m_z^w}{\hbar^2}\left(E - \frac{E_g^w}{2}\right) - \frac{m_z^w}{m_x^w}k_x^2 - \frac{m_z^w}{m_y^w}k_y^2}, \quad (6a)$$

$$k_i = \sqrt{\frac{2m_z^{bi}}{\hbar^2}(V(z) - E) + \frac{m_z^{bi}}{m_x^{bi}}k_x^2 + \frac{m_z^{bi}}{m_y^{bi}}k_y^2} \quad (i = l, r). \quad (6b)$$

表 1　[111]，[100]和[110]取向的Ⅳ-Ⅵ族半导体量子阱中 Rashba 效应引起的有效磁场

取向	$B_{eff}^x/m_0^2\cdot\hbar^{-2}$	$B_{eff}^y/m_0^2\cdot\hbar^{-2}$	$B_{eff}^z/m_0^2\cdot\hbar^{-2}$	$\mid B_{eff}\mid/m_0^2\cdot\hbar^{-2}$	简并度
[111]	$-k_y$	k_x	0	$\sqrt{k_x^2+k_y^2}$	1
	$-k_y$	$\frac{1+8r}{9}k_x$	$\frac{2\sqrt{2}(r-1)}{9}k_x$	$\sqrt{k_x^2(8r^2+1)/9+k_y^2}$	3
[100]	$-k_y$	$\frac{1+2r}{3}k_x$	$\frac{2\sqrt{2}(r-1)}{3}k_x$	$\sqrt{k_x^2(6r^2+3)/9+k_y^2}$	4
[110]	$-k_y$	$\frac{2+r}{3}k_x$	$\frac{2\sqrt{2}(r-1)}{9}k_x$	$\sqrt{k_x^2(r^2+2)/3+k_y^2}$	2
	$-k_y$	rk_x	0	$\sqrt{k_x^2r^2+k_y^2}$	2

注：$r = P_\perp/P_{/\!/}$.

Hasegawa 等[9] 曾用(5)式计算过[111]取向的 $Pb_{1-y}Eu_yTe/PbTe/Pb_{1-x}Eu_xTe$ 非对称量子阱中的自旋-轨道耦合分裂能，但文献[9]中将(5)式左边第一项中 k_w 写成 k，存在印刷上的错误，而且 $Pb_{1-x}Eu_xTe$材料中的 Eu^{2+} 是具有磁性的，文献[9]没有考虑该磁性对自旋-轨道耦合的影响.我们计算了 $Pb_{1-y}Sr_yTe/PbTe/Pb_{1-x}Sr_xTe$ 非对称量子阱结构中的 Rashba 自旋-轨道耦合分裂能.量子阱的生长方向不仅包含[111]，还包含其他取向(如[100]，[110]).

3. 结果及讨论

根据以上理论，我们首先计算了[100]取向 $Pb_{0.88}Sr_{0.12}Te/PbTe/Pb_{0.91}Sr_{0.09}Te$ 非对称量子阱中 Rashba 自旋-轨道耦合分裂能.图 2(a)和(b)分别是 PbTe 量子阱中不同自旋的电子沿 k_x 方向的基态能量和相应的自旋-轨道耦合分裂能.计算中用到的参量取值如下：阱宽 $w_z = 5$ nm，带阶参量 $Q_l = 0.6$，$Q_r = 0.5$，温度为 300 K.从图 2 可以看出，由于 Rashba 自旋-轨道耦合效应，使得不同自旋的电子能量出现分裂，分裂能随着 k_x 的增加而增加.当 $k_x < 2.0\times10^6$ cm^{-1}时，自旋分裂能随 k_x 增大呈近似线性增长关系，而当 $k_x > 2.0\times10^6$ cm^{-1}，自旋分裂能开始出现饱和现象.k_x 增加意味着电子总能量的增加，使得(3)式中 Rashba 项常数 α_{so}减小，但同时有效磁感应强度 $\boldsymbol{B}_{eff}(k_{/\!/})$却随 k_x 增大而增加.因此从数学上看，上述现象是 α_{so}和 $\boldsymbol{B}_{eff}(k_{/\!/})$相互竞争的结果，但其物理根源在于 PbTe 阱层材料的有效带隙随着波矢 k_x 的增加而增大，使得带间耦合随之减弱.在Ⅲ-Ⅴ族量子阱中也同样存在 Rashba 自旋分裂与波矢 k 的非线性关系，文献[15]首先从理论上做出了解释.相比较而言，Ⅳ-Ⅵ族半导体的 Rashba 自旋分裂出现非线性行为的临界波矢较小，这是因为Ⅳ-Ⅵ族半导体的带隙比Ⅲ-Ⅴ族半导体的带隙小.当 $k_x = 2.0\times10^6$ cm^{-1}时，Rashba 自旋-轨道耦合分裂能为 2.2 meV，这是相同阱宽和 k_x 条件下 $AlAs/GaAs/Al_{0.15}Ga_{0.85}As$非对称量子阱中的自旋-轨道耦合分裂能($E_{so} < 0.9$ meV)[14] 的 2.4 倍.

在相同阱宽和带阶参量条件下我们也计算了其他温度下的[100]取向的 PbTe 量子阱中基态电子能量与 k_x 的变化关系，结果如图 3 所示.由图 3 可以看出，随着温度的降低，自旋-轨道耦合分裂能明显增加.在低温条件下，自旋-轨道耦合分裂能在 $k_x < 2.0\times10^6$ cm^{-1}范围随 k_x 线性增加速率比高温条件下更快，并且当 k_x 继续增加时，自旋-轨道耦合分裂能出现减小趋势.这与室温条件下自旋-轨道耦合分裂能的变化趋势不同.对于 PbTe 和 $Pb_{0.88}Sr_{0.12}Te$，其

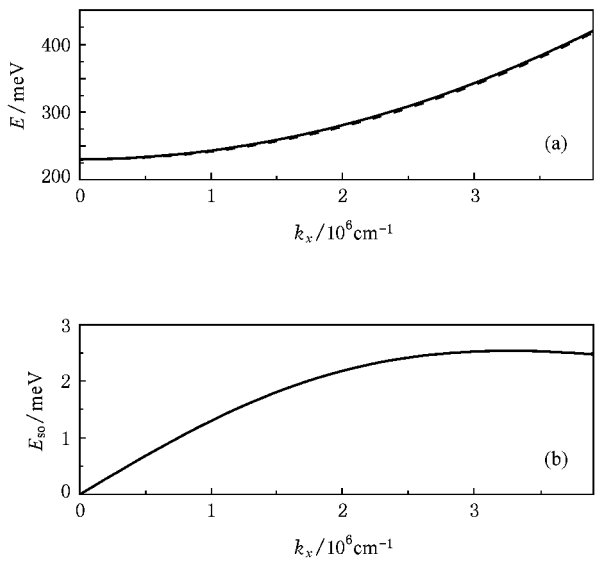


图 2 [100]取向的 $Pb_{0.88}Sr_{0.12}Te/PbTe/Pb_{0.91}Sr_{0.09}Te$ 非对称量子阱中不同自旋的基态电子能量 E 和 Rashba 自旋-轨道耦合分裂能 E_{so} 与 k_x 的关系 (a) E 与 k_x 的关系,实线表示自旋向上,虚线表示自旋向下;(b) E_{so} 与 k_x 的关系

带隙随着温度的降低而减小,电子的有效质量也随温度的降低而减小[16],使得动量矩阵元 $P_{/\!/}$ 和 $P_{\perp}$ 随温度的减小而增加.由(3)式可知,Rashba 项常数 β_{so} 随温度的降低而增加,即带间耦合增强,所以电子的 Rashba 效应的非线性行为在低温下更加明显.

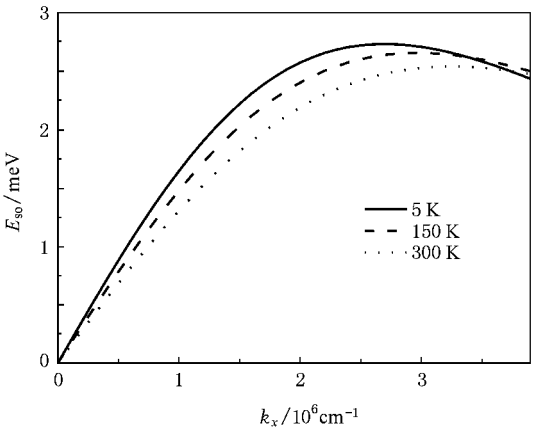


图 3 不同温度下[100]取向的 $Pb_{0.88}Sr_{0.12}Te/PbTe/Pb_{0.91}Sr_{0.09}Te$ 量子阱中基态电子的 Rashba 自旋-轨道耦合分裂能 E_{so} 与 k_x 的关系

以上讨论了特定的能带结构($Q_1 = 0.6$, $Q_r = 0.5$)下[100]取向的 $Pb_{0.88}Sr_{0.12}Te/PbTe/Pb_{0.91}Sr_{0.09}Te$ 量子阱中 Rashba 自旋-轨道耦合分裂效应.在非对称的 PbTe 量子阱中,能带结构的变化对 Rashba 效应的影响是非常重要的.一般而言,带阶参量的改变对量子阱中电子空穴跃迁能的计算影响不大.计算表明,选择不同的带阶参量 Q(变化范围从 0.1 到 0.9)对跃迁能的计算结果产生的误差小于 5%.但自旋-轨道耦合分裂能的计算中,对带阶参量的变化却是敏感的.图 4 给出了 PbTe(100)量子阱中 Rashba 自旋-轨道耦合分裂能与界面处带阶差($\Delta Q = Q_l - Q_r$, $Q_r = 0.5$)的变化关系.当 ΔQ 从 -0.1 增加到 0.5 时,Rashba 自旋-轨道耦合分裂能从 -1.07 meV 增加到 5.43 meV.而且当 $Q_l = Q_r = 0.5$ 时,自旋-轨道耦合分裂能仍有 0.813 meV.应当指出,Hasegawa 等[9]在 $Q_l = Q_r = 0.5$ 条件下计算得到[111]取向的 $Pb_{0.91}Eu_{0.09}Te/PbTe/Pb_{0.93}Eu_{0.07}Te$ 量子阱中自旋-轨道耦合分裂能的数值几乎为零,即 Rashba 效应消失.而我们计算得到[111]取向的 PbTe 量子阱的自旋-轨道分裂能的数值为 0.807 meV,原因在于我们的 $Pb_{0.88}Sr_{0.12}Te/PbTe/Pb_{0.91}Sr_{0.09}Te$ 量子阱结构左右非对称性比文献[9]所用的量子阱结构更明显.但可以肯定,在导带和价带处于镜面对称条件下,[100]取向的 PbTe 量子阱中 Rashba 自旋-轨道耦合效应比[111]取向的 PbTe 量子阱的大,Rashba 效应的根源在于量子阱结构的左右非对称性.当量子阱结构的非对称性显著时(同时存在左右非对称性及导带和价带镜面非对称性),Rashba 效应也变得更明显,从图 4 可以清楚地看到这一点.上述现象也同样存在于外电场作用下的Ⅲ-Ⅴ族 InAs/GaSb 量子阱中.所不同的是,由于 InAs/GaSb 量子阱能带结构属于Ⅱ型,Rashba 自旋-轨道耦合分裂能随波矢 k 的增加不仅出现非线性行为,还出现振荡现象[17].对于Ⅳ-Ⅵ族量子阱具有较大的 Rashba 自旋-轨道耦合分裂能并且随带阶参量变化明显的特点,将来有可能用于实验上精确测定不同Ⅳ-Ⅵ族异质体系的带阶参量.

当给定带阶参量和波矢 k_x 时,PbTe (100) 量子阱中的 Rashba 自旋-轨道耦合分裂能也是阱宽 w_z 的函数,如图 5 所示.Rashba 自旋-轨道耦合分裂能在阱宽为 5.0 nm 时达到最大值,为 2.2 meV.随着阱宽的增加或减小,自旋-轨道耦合分裂能都将减小.由(3)式可以看出,当阱宽变窄时电子的能量急剧增加,使得 Rashba 项常数随之减小,带间耦合减弱.而当量子阱变宽时,量子阱限制效应减弱,使得量子阱非对称性作用减弱,阱层接近体材料.[111]和[110]取向的 PbTe 量子阱中 Rashba 自旋-轨道耦合分裂能与阱宽 w_z 的关系也在图 5 给出.从图 5 可以看出,

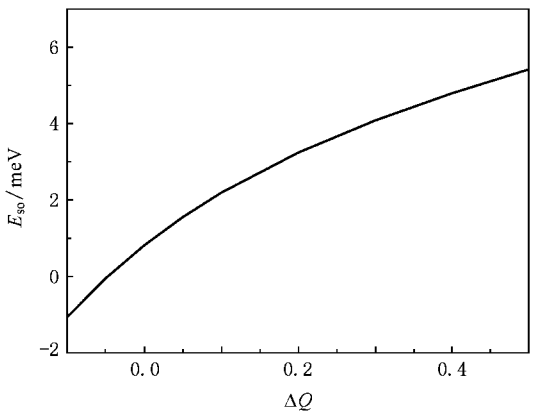


图 4　在特定波矢 $k_x = 2.0 \times 10^6$ cm^{-1} 下 Rashba 自旋-轨道耦合分裂能 E_{so} 与量子阱左右界面处带阶参量差 $\Delta Q = Q_l - Q_r$ 的关系

不同取向的 PbTe 量子阱获得最大 Rashba 分裂能的阱宽也不同. 对[111]取向的量子阱而言，纵向能谷在阱宽为 2.1 nm 时 Rashba 分裂能最大，斜能谷的 Rashba 分裂能在 5.6 nm 时达到最大. 相比较而言，[110]取向的量子阱可以在较大阱宽下获得最大 Rashba 分裂能，其两组斜能谷 O_1 和 O_2 获得最大 Rashba 分裂能的阱宽分别为 3.8 和 5.9 nm.

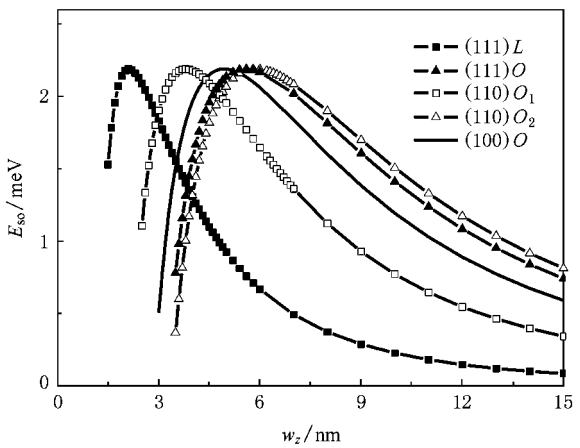


图 5　在特定波矢 $k_x = 2.0 \times 10^6$ cm^{-1} 下不同取向量子阱的 Rashba 自旋-轨道耦合分裂能 E_{so} 与阱宽 w_z 的关系

由图 5 可知，对具有各向异性和多能谷结构的Ⅳ-Ⅵ族半导体量子阱而言，生长取向对 Rashba 效应的影响是重要的，因而有必要进一步研究不同生长取向的 PbTe 量子阱中 Rashba 自旋-轨道耦合分裂效应. 图 6 给出了不同生长取向的 PbTe 量子阱的 Rashba 自旋-轨道耦合分裂能. 对于[100]取向的量子阱，量子限制效应并不解除能谷的四度简并，因而每个能谷中电子自旋-轨道分裂能都相同. 对于[111]取向的量子阱，4 个能谷在量子限制作用下分裂成 1 个纵向能谷 L 和 3 个三度简并的斜能谷 O. 这两组能谷中的电子自旋-轨道耦合分裂能是不同的(图 6). 由图 6 可以看出，纵向能谷的 Rashba 自旋-轨道耦合分裂能比较小($E_{so} < 1$ meV)，而斜能谷的 Rashba 自旋-轨道耦合分裂能却很大，当 $k_x = 3.0 \times 10^6$ cm^{-1} 时是纵向能谷分裂能的 2.5 倍. 而且[111]取向量子阱的斜能谷的 Rashba 自旋-轨道耦合分裂能几乎与[100]取向量子阱斜能谷接近. 对于[110]取向的量子阱，4 个能谷在量子限制作用下分裂成两组两度简并的斜能谷 O_1 和 O_2. 与[111]取向量子阱中能谷间存在较大差异有所不同，[110]取向量子阱中两组斜能谷的 Rashba 自旋-轨道耦合分裂能差别较小. 但是其中一组斜能谷的 Rashba 自旋-轨道耦合分裂能与波矢 k_x 的变化关系和[100]取向及[111]取向量子阱的斜能谷的分裂能相近. 需要注意的是，不同取向的量子阱中各个非简并能谷的波矢 k_x 的方向是不同的，即不同能谷的 Rashba 效应是各向异性的.

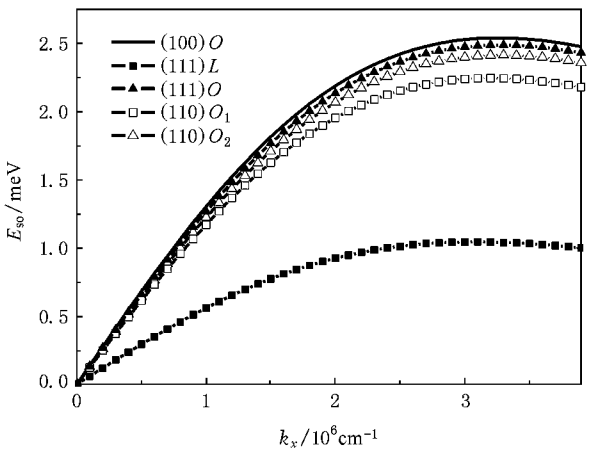


图 6　不同生长取向的 PbTe 量子阱中 Rashba 自旋-轨道耦合分裂能 E_{so} 与 k_x 的关系

4. 结　论

我们基于 $k \cdot p$ 四带包络波函数理论计算了不同取向的Ⅳ-Ⅵ族半导体 PbTe 非对称量子阱结构中的 Rashba 自旋-轨道耦合分裂能. 计算结果表明，Rashba 效应来源于量子阱结构的非对称性，并受生长取向、阱宽、温度和波矢 k_x 的影响. 在[100]取向的 PbTe 量子阱中，Rashba 自旋-轨道耦合分裂能在

阱宽为 5.0 nm 时达到最大值，为 2.2 meV. 而在[111]取向的 PbTe 量子阱中，纵向能谷和斜能谷达到最大 Rashba 自旋-轨道耦合分裂能的阱宽分别为 2.1 和 5.6 nm. 在给定 w_z 和 k_x 时，[111]取向量子阱中纵向能谷的自旋-轨道耦合分裂能要比斜能谷的分裂能小，纵向能谷的分裂能约为斜能谷分裂能的 1/4. [110]取向 PbTe 量子阱中两组两度简并的斜能谷间 Rashba 自旋-轨道耦合分裂能比较接近，各自达到最大值的阱宽分别为 3.8 和 5.9 nm. 另外，理论计算也表明，Rashba 效应对量子阱结构的非对称性参量(如阱层界面的带阶比 Q_1 和 Q_r)的变化非常敏感，当 $\Delta Q = Q_1 - Q_r$ 从 -0.1 增加到 0.5 时，Rashba 自旋-轨道耦合分裂能从 -1.07 meV 增加到 5.43 meV. 因而将来有可能通过测量Ⅳ-Ⅵ族半导体量子阱中 Rashba 自旋-轨道耦合分裂能来获得带阶参量方面的信息. 这比通过测量带间跃迁能来估算带阶参量更准确，因为带阶参量的改变对跃迁能的影响并不显著(带阶参量改变引起的跃迁能理论值的变化小于 5%). 我们的理论计算进一步丰富了人们对Ⅳ-Ⅵ族半导体非对称量子阱中 Rashba 效应的认识，并为将来Ⅳ-Ⅵ族量子阱自旋器件的研制提供了有益的参考.

[1] Rashba E I, Efros A L 2003 *Phys. Rev. Lett.* **91** 126405

[2] Jiang J H, Weng M Q, Wu M W 2006 *J. Appl. Phys.* **100** 063709

[3] Yang W, Chang K 2006 *Phys. Rev.* B **74** 193314

[4] Pfeffer P, Zawadzki W 1995 *Phys. Rev.* B **52** R14332

[5] Qiu 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]

[6] Wu Y, Jiao Z X, Lei L, Wen J H, Lai T S, Lin W Z 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 2961 (in Chinese) [吴 羽、焦中兴、雷 亮、文锦辉、赖天树、林位株 2006 物理学报 **55** 2961]

[7] Koga T, Nitta J, Takayanagi H, Datta S 2002 *Phys. Rev. Lett.* **88** 126601

[8] de Andrada e Silva E A, La Rocca G C 1999 *Phys. Rev.* B **59** R15583

[9] Hasegawa M M, de Andrada e Silva E A 2003 *Phys. Rev.* B **68** 205309

[10] Dresselhaus G 1955 *Phys. Rev.* **100** 580

[11] Bychkov Y A, Rashba E I 1984 *JETP Lett.* **39** 78

[12] Bychkov Y A, Rashba E I 1984 *J. Phys. C: Solid State Phys.* **17** 6039

[13] Xu T N, Wu H Z, Si J X, McCann P J 2007 *Phys. Rev.* B **76** 155328

[14] de Andrada e Silva E A, La Rocca G C, Bassani F 1997 *Phys. Rev.* B **55** 16293

[15] Yang W, Chang K 2006 *Phys. Rev.* B **73** 113303

[16] Preier H 1979 *Appl. Phys.* **20** 189

[17] Li J, Chang K, Hai G Q, Chan K S 2008 *Appl. Phys. Lett.* **92** 152107

Rashba effect in PbTe/PbSrTe asymmetric quantum wells*

Xu Tian-Ning[1)2)] Wu Hui-Zhen[1)†] Sui Cheng-Hua[2)]

1)(*Department of Physics, Zhejiang University, Hangzhou* 310027, *China*)

2)(*Department of Science, Zhijiang College of Zhejiang University of Technology, Hangzhou* 310024, *China*)

(Received 29 March 2008; revised manuscript received 6 August 2008)

Abstract

Recently, spin effect in narrow gap semiconductor heterostructures has attracted much attention. However, Rashba spin effect is quite different in Ⅳ-Ⅵ asymmetric quantum wells (QWs) with various growth orientations due to their multivalley and anisotropic band structures. In this work, we calculated Rashba splitting in $Pb_{1-y}Sr_yTe/PbTe/Pb_{1-x}Sr_xTe$ asymmetric QWs with growth orientations [100], [110] and [111]. The results show that Rashba splitting reaches the maximum of 2.2 meV when the well width of PbTe QWs with growth orientation [100] is 5.0 nm, and two groups of Rashba splitting is obtained in PbTe and QWs with growth orientations [110] and [111], respectively, because the quantum confinement lifts off the fourfold degeneracy of the *L*-energy valleys. The dependences of Rashba splitting on asymmetry of QWs, well width, temperature and $\boldsymbol{k}_{//}$ (the wave vactor in the plane) are also investigated. Large Rashba spin splitting may make Ⅳ-Ⅵ asymmetric QWs as a material candidate for spintronic devices.

Keywords: Ⅳ-Ⅵ semiconductor, asymmetric quantum wells, Rashba effect, spin-orbit-splitting

PACC: 7320D, 7850G

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 10434090) and the Doctoral Foundation of Ministry of Education, China (Grant No. 20060335035).

† Corresponding author. E-mail: hzwu@zju.edu.cn