

Спиновая деполяризация и переход металл–диэлектрик в двумерной системе в нулевом магнитном поле

© И.А. Шелых, Н.Т. Баграев, Л.Е. Клячкин

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

E-mail: impurity.dipole@mail.ioffe.ru

(Поступила в Редакцию 16 января 2003 г.)

Условия возникновения спонтанной спиновой поляризации в двумерной системе в нулевом магнитном поле анализируются для случая слабого заполнения нижних подзон размерного квантования, когда обменное взаимодействие носителей тока доминирует над их кинетической энергией. В рамках приближения Хартри–Фока определяется критическая концентрация, выше которой происходит полная спиновая деполяризация двумерного газа носителей тока, что, возможно, связано с его переходом в металлическое состояние.

Работа поддержана МНТЦ (грант № 2136).

Развитие нанотехнологии позволило получить двумерные полупроводниковые системы, характеризующиеся низкой концентрацией носителей тока с высокой подвижностью. Подобные системы проявляют баллистические свойства при выполнении условия $k_B T \tau / \hbar > 1$, где $\hbar/k_B T$ — время электрон–электронного взаимодействия, а $\tau = m^* \mu / e$ — транспортное время релаксации [1–14]. По сравнению с диффузионным режимом ($k_B T \tau / \hbar < 1$) в процессах баллистического транспорта значительно усиливается роль спиновых корреляций [2–4]. Одним из их наиболее ярких проявлений в транспорте носителей тока стало обнаружение перехода металл–диэлектрик в кремниевых МОП транзисторах в нулевом магнитном поле [1] вопреки предсказаниям однопараметрической скейлинговой теории локализации о невозможности возникновения металлического состояния в двумерных системах [5]. Спиновая природа металлического состояния, обнаруженного также в двумерном газе электронов и дырок в гетеропереходах Si–Ge [6] и GaAs–GaAlAs [7,8], проявляется прежде всего в его разрушении в магнитном поле, приложенном в плоскости двумерной системы, которое восстанавливает режим слабой или сильной локализации. Тем не менее механизм перехода металл–диэлектрик в двумерных системах, вклад в который могут вносить спин–орбитальное взаимодействие [2,9,10,11] и спонтанная спиновая поляризация вследствие обменного и корреляционного межчастичных взаимодействий [4,12,13], продолжает находиться в процессе идентификации. В частности, данные измерений полевых зависимостей проводимости двумерного электронного газа вблизи критической плотности электронов n_c , соответствующей переходу металл–диэлектрик, указывают на наличие спонтанной поляризации в этих условиях [12,15]. Однако эти результаты не согласуются с данными исследований осцилляций Шубникова–де Газа и спиновой восприимчивости, которые показывают, что тенденция к ферроупорядочению сопровождается трансформацией нормального металла в двумерный изолятор, минуя спонтанно поляризованное состояние

с делокализованными волновыми функциями [9,14,16]. Поэтому основным вопросом остается взаимосвязь перехода металл–диэлектрик со значениями критической концентрации носителей тока, выше которой происходит полная спиновая деполяризация спонтанно поляризованного двумерного газа. В настоящей работе критическая концентрация носителей тока, выше которой двумерный газ полностью деполяризуется, определяется с помощью приближения Хартри–Фока, в рамках которого рассматриваются условия возникновения спонтанной спиновой поляризации в двумерной системе в нулевом магнитном поле.

1. Спонтанная спиновая поляризация в двумерной системе в нулевом магнитном поле

Рассмотрим систему фермионов, описываемых уравнением Шредингера

$$H\Psi = E\Psi, \quad (1)$$

где $H = H_0 + H_1$, H_0 соответствует гамильтониану невзаимодействующих фермионов и зависит от размерности рассматриваемой системы, H_1 учитывает их взаимодействие.

При рассмотрении двумерных систем, в частности фермионного газа внутри квантовой ямы, к кинетической энергии добавляется потенциальная, соответствующая размерному квантованию движения носителя в направлении z , перпендикулярном плоскости квантовой ямы,

$$H_0^{2D} = \sum_{j=1}^N \left(\frac{\mathbf{p}_j^2}{2m^*} + U(z_j) \right). \quad (2)$$

Невозмущенными одночастичными волновыми функциями являются произведения волновых функций размерного квантования и плоских волн, параллельных

квантовой яме,

$$\psi_{k,m}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega_{2D}}} e^{i\mathbf{k}\boldsymbol{\rho}} \varphi_m(z), \quad (3)$$

где m — номер подзоны размерного квантования вдоль оси z , $\boldsymbol{\rho} = \mathbf{i}x + \mathbf{j}y$, Ω_{2D} — двумерный объем.

Если концентрация невзаимодействующих носителей достаточно мала, так что они заполняют только низшую подзону размерного квантования, то полная энергия электронного газа равна кинетической энергии, и ее плотность может быть легко вычислена

$$\varepsilon_{\text{kin}}^{2D} = \sum_{k < k_F} g_s \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2}{16\pi m^*} g_s k_F^4 = \frac{\pi \hbar^2 n_{2D}^2}{m^* g_s}, \quad (4)$$

где k_F — фермиевское значение волнового числа, определяемое из условия

$$\pi k_F^2 = \frac{(2\pi)^2}{g_s} n_{2D}, \quad (5)$$

n_{2D} — концентрация носителей тока в двумерном газе, g_s — спиновый фактор, равный числу электронов в элементарной ячейке фазового пространства. неполяризованному состоянию двумерного газа соответствует значение $g_s = 2$, полностью поляризованному — $g_s = 1$, значения $1 < g_s < 2$ соответствуют частичной спиновой поляризации.

Рассмотрим возможность возникновения спонтанной поляризации в квазидвумерной системе вследствие обменного взаимодействия. Поляризованное состояние двумерного газа невзаимодействующих фермионов всегда энергетически менее выгодно, поскольку его кинетическая энергия всегда больше кинетической энергии неполяризованного состояния. Для системы взаимодействующих частиц, однако, появляется добавка к энергии E_1 , которую можно изобразить при помощи бесконечной последовательности диаграмм

$$\varepsilon_{\text{core}} + \varepsilon_{\text{el-el}} = \text{[diagrams]} + \dots \quad (6)$$

Обменные диаграммы 3 и 5, как легко видеть, существенным образом зависят от спиновой поляризации системы. В самом деле, вследствие независимости взаимодействия от спина последний должен сохраняться в вершинах диаграммы. Таким образом, процессы, описываемые обменными диаграммами, могут происходить только между частицами с одинаковым спином, вследствие чего вклад таких диаграмм более существен при рассмотрении поляризованных, чем неполяризованных систем. Поскольку диаграмма 2 вносит отрицательный вклад, спин-поляризованное состояние может быть более энергетически выгодным по сравнению с неполяризованным.

Ограничимся рассмотрением первых двух диаграмм, что соответствует учету межчастичных взаимодействий

в рамках приближения Хартри–Фока. Имеем

$$E_1 = \frac{1}{2} \sum_{E_K, E_L < E_F} [\langle KL|V|KL\rangle - \langle KL|V|LK\rangle], \quad (7)$$

где первый член соответствует хартриевской, второй — фоковской обменной добавке к энергии; в сумму включено суммирование по спиновым индексам. Первый член расходится в термодинамическом пределе $N \rightarrow \infty$, $\Omega_{2D} \rightarrow \infty$, $N/\Omega_{2D} = n_{2D} = \text{const}$. Однако он компенсируется членом взаимодействия с положительным фоном. Таким образом, в первом порядке обменная компонента взаимодействия играет решающую роль

$$E_{\text{exc}} = -\frac{1}{2} \sum_{K,L < k_f} \langle KL|V|LK\rangle = -\frac{g_s e^2 \Omega_{2D}}{2(2\pi)^4} \int e^{-i\mathbf{k}\boldsymbol{\rho}} d\mathbf{k} \times \int e^{i\mathbf{l}\boldsymbol{\rho}} d\mathbf{l} \int \frac{|\varphi(z')|^2 |\varphi(z'')|^2}{\sqrt{\rho^2 + (z' - z'')^2}} d\rho dz' dz'', \quad (8)$$

где площадь квантовой ямы Ω_{2D} и спиновый фактор g_s вводятся при вычислении матричного элемента обменного взаимодействия как результат суммирования по спинам. Вычисление интегралов по \mathbf{k}, \mathbf{l} приводит к выражению для энергии обменного взаимодействия

$$E_{\text{exc}} = -\frac{e^2 k_F^2 \Omega_{2D}}{4\pi} \int |\varphi(z)|^2 |\varphi(z')|^2 dz dz' \times \int_0^\infty \frac{J_1^2(k_F \rho)}{\rho \sqrt{\rho^2 + (z' - z'')^2}} d\rho, \quad (9)$$

где $J_1(k_F \rho)$ — функция Бесселя. Входящий в эту формулу интеграл I , где $\alpha = k_F |z - z'| \sim k_F d$, d — ширина квантовой ямы, целесообразно оценить при условии

$$k_F d \ll 1, \quad (10)$$

которое соответствует слабому заполнению нижних подзон размерного квантования. В этом случае $I = Ak_F$, где $A \approx 0.424$. Таким образом, для плотности энергии обменного взаимодействия в двумерном газе носителей тока получаем

$$\begin{aligned} \varepsilon_{\text{exc}} &= E_{\text{exc}}/\Omega_{2D} = -\frac{g_s A e^2 k_F^3}{4\pi} \int |\varphi(z')|^2 |\varphi(z'')|^2 dz' dz'' \\ &= g_s \frac{A e^2 k_F^3}{4\pi} = -\frac{\beta_{2D}}{g_s^{1/2}} n_{2D}^{3/2}, \end{aligned} \quad (11)$$

где $\beta_{2D} = 2\sqrt{\pi} A e^2$. Полученное выражение отрицательно и не зависит от волновых функций невзаимодействующих частиц, т.е. от формы квантовой ямы. Его зависимость от n_{2D} может быть „угадана“ из соображений размерности. Подчеркнем еще раз, что формула (11) для плотности обменной энергии двумерного электронного газа справедлива только при достаточно низких концентрациях, когда выполняется условие (10).

Оценим значение k_F , соответствующее началу заполнения второй подзоны размерного квантования ямы. Поскольку дно j -й подзоны в прямоугольной яме определяется как $E_j = \pi^2 \hbar^2 j^2 / 2m^* d^2$, для оценки значения волнового числа k_0 , соответствующего началу заполнения второй подзоны, имеем $E_2 - E_1 \approx 3\pi^2 \hbar^2 / 2m^* d^2 \approx \hbar^2 k_0 / 2m^*$; $k_0 d \approx \sqrt{3} \pi \approx 5.44$. Следовательно, приближение (10) справедливо не для любой квантовой ямы с единственной заполненной подзоной, вследствие чего представляет интерес оценка интеграла I в пределе, противоположном (10), т. е. когда $k_F d \gg 1$. В этом случае $I = B/|z - z'|$, где $B \approx 0.498$. Соответственно для плотности обменной энергии имеем

$$\varepsilon_{\text{exc}} = -g_s \frac{B e^2 k_F^2}{4\pi} \int \frac{|\varphi(z')|^2 |\varphi(z'')|^2}{|z - z'|} dz' dz'' = -\chi_{2D} n_{2D},$$

$$\chi_{2D} \approx B e^2 \int \frac{|\varphi(z')|^2 |\varphi(z'')|^2}{|z - z'|} dz' dz''. \quad (12)$$

Таким образом, зависимость энергии обменного взаимодействия от концентрации носителей тока в двумерной системе существенно различается в области высоких и низких концентраций. Интересно отметить, что в пределе высоких концентраций обменная энергия не зависит от степени поляризации, поскольку обменное взаимодействие для двумерных систем является короткодействующим в k -пространстве.

Для ответа на вопрос, способно ли обменное взаимодействие приводить к спонтанной спиновой поляризации в низкоразмерных системах, необходимо сравнить полные энергии поляризованного и неполяризованного состояний двумерного газа носителей тока. В пределе низких концентраций носителей плотность энергии равна

$$\varepsilon^{2D} = \varepsilon_{\text{kin}} + \varepsilon_{\text{exc}} \approx \frac{\pi \hbar^2 n_{2D}^2}{m^* g_s} - \frac{\beta_{2D}}{g_s^{1/2}} n_{2D}^{3/2}, \quad (13)$$

где первое слагаемое соответствует кинетической энергии, а второе — энергии обменного взаимодействия. Энергии поляризованного ($g_s = 1$) и неполяризованного ($g_s = 2$) состояний соответственно равны $\varepsilon^{2D}|_{g_s=1} \approx \pi \hbar^2 n_{2D}^2 / m^* - \beta_{2D} n_{2D}^{3/2}$ и $\varepsilon^{2D}|_{g_s=2} \approx \pi \hbar^2 n_{2D}^2 / 2m^* - \beta_{2D} n_{2D}^{3/2} / \sqrt{2}$.

Легко видеть (см. (13)), что, если концентрация носителей тока превышает критическое значение n_0 , равное

$$n_0 = \left[\frac{(2 - \sqrt{2}) m^* \beta_{2D}}{\pi \hbar^2} \right]^2, \quad (14)$$

кинетическая энергия превышает энергию обменного взаимодействия и неполяризованное состояние энергетически более выгодно по сравнению с полностью поляризованным. С другой стороны, если концентрация носителей тока не превышает критического значения n_0 и обменная энергия доминирует, энергетически выгодным является поляризованное состояние. Заметим, что n_0 зависит только от эффективной массы носителей тока и

возрастает с ее увеличением. В свою очередь эффективная масса уменьшается при увеличении концентрации носителей тока в двумерной системе.

Следует отметить две особенности обсуждаемого механизма спонтанной спиновой поляризации двумерного газа носителей тока. Во-первых, проведенное рассмотрение относится к квазидвумерному случаю, в рамках которого функции размерного квантования вводятся в явном виде, и оказывается, что в пределе низких значений n_{2D} от них ничего не зависит. Причем возможность возникновения ферромагнитного упорядочения в квазидвумерной системе в пределе низкой концентрации носителей тока практически сводится к результатам рассмотрения спонтанной спиновой поляризации в строго двумерном случае, где стабильность ферромагнитного состояния вследствие обменного взаимодействия доказана с учетом корреляционных поправок [17–19]. Во вторых, учет корреляционной энергии крайне важен для определения концентрации носителей тока, при которой происходит вигнеровская кристаллизация в двумерном газе, составляющая серьезную конкуренцию рассмотренному выше переходу в спонтанно поляризованное состояние с делокализованными волновыми функциями [20–25]. Однако, согласно теоретическим оценкам [22–25], вигнеровский кристалл формируется при значениях плотности n_{2D} ниже $\cong m^2 e^4 / r_s^2 \hbar^2$, где параметр r_s представляет собой отношение потенциальной энергии к кинетической, соответствующее переходу к кристаллическому состоянию. В зависимости от выбранной модели величина r_s варьируется от 30 до 100 [22–25]. В свою очередь определенное выше значение критической концентрации, при которой происходит полная деполяризация спонтанно поляризованного двумерного газа носителей тока (см. (14)), соответствует $n_0 \sim 0.5 m^2 e^4 / \hbar^2$. Таким образом, спиновая спонтанная поляризация в двумерной системе возникает, когда кинетическая энергия порядка потенциальной, тогда как вигнеровская кристаллизация происходит при их отношении порядка один к ста. Иными словами, переход в кристаллическое состояние начинается при значении плотности n_{2D} , на два–четыре порядка меньше чем переход в спонтанно поляризованное состояние с делокализованными волновыми функциями. Более точный счет [23–25] ограничивает возникновение спонтанной спиновой поляризации интервалом $10 < r_s < 30$, ниже которого она резко уменьшается, по-видимому вследствие жесткости условия (10). Тем не менее указанное ограничение не влияет на возможность использования приближения Хартри–Фока для анализа процессов ферроупорядочения в условиях обменного взаимодействия, даже если учесть корреляционные поправки, а только обозначает концентрационные рамки применения для этой цели плоских волн как функций начального приближения.

Подчеркнем, что проведенное рассмотрение соответствует пределу низких плотностей носителей тока в двумерной системе, $k_F d \ll 1$, который накладывает серьез-

ные ограничения на ширину квантовой ямы ($d \leq 20$ nm), если принять во внимание экспериментально определенные значения n_c [15,16]. Если данное условие не выполняется, то двумерную систему следует анализировать в пределе высоких концентраций носителей тока, $k_F d \gg 1$, в рамках которого неполяризованное состояние всегда энергетически более выгодно, чем поляризованное, вследствие независимости обменной энергии от g_s .

2. Взаимосвязаны ли спиновая деполяризация и переход металл–диэлектрик в двумерной системе?

Значения эффективной массы для двумерных электронов и дырок, полученные при исследовании кремниевых МОП транзисторов [9] и гетеропереходов GaAs–AlGaAs [7] вблизи критической концентрации n_c перехода в металлическое состояние, были использованы для построения соответствующих зависимостей n_0 от m^* (рис. 1 и 2). Видно, что спонтанная спиновая поляризация резко уменьшается при значениях концентрации двумерного газа электронов и дырок выше n_c . Следует отметить, что приведенные на рис. 1 и 2 зависимости показывают, насколько существенными могут быть флуктуации в значениях n_c для обнаружения тенденции к ферромагнитному упорядочению двумерного электронного газа в кремниевых МОП транзисторах. При

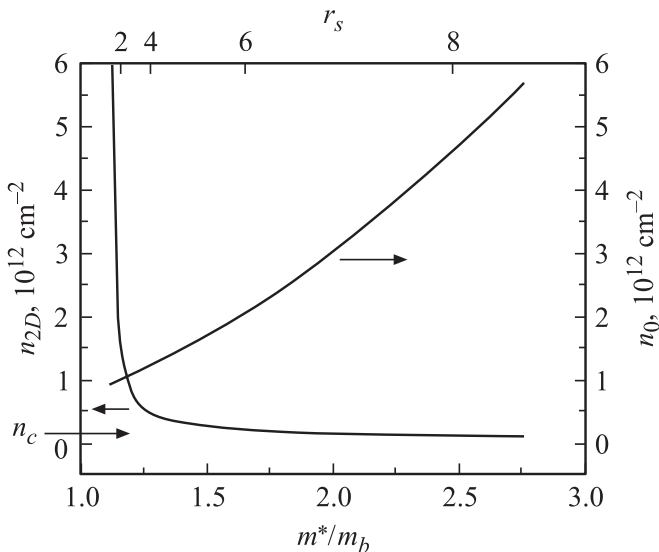


Рис. 1. Зависимость критической концентрации электронов n_0 , соответствующей полной спиновой деполяризации двумерного электронного газа в кремниевых МОП структурах, от значения эффективной массы, зависимость которой от концентрации электронов n_{2D} , представленная на этом же рисунке, определялась в [9]. $m_b = 0.19m_0$, n_c — критическая концентрация электронов, при которой наблюдается переход металл–диэлектрик в кремниевых МОП структурах [9].

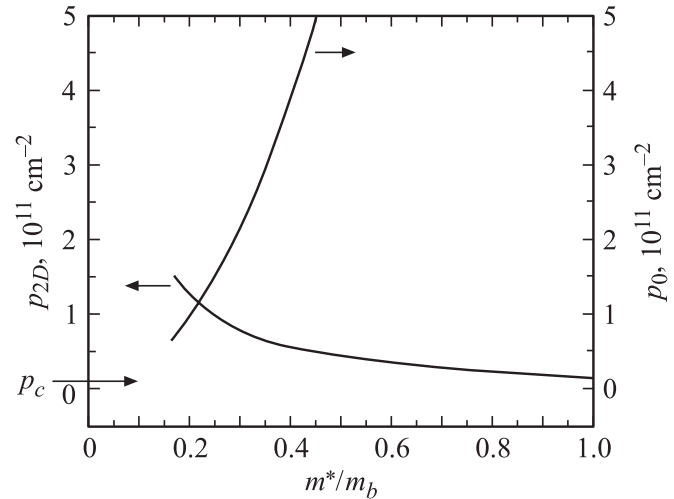


Рис. 2. Зависимость критической концентрации дырок p_0 , соответствующей полной спиновой деполяризации двумерного дырочного газа в гетероструктуре GaAs–GaAlAs, от значения эффективной массы, зависимость которой от концентрации электронов p_{2D} , представленная на этом же рисунке, определялась в [7]. $m_b = 0.38m_0$, p_c — критическая концентрация дырок, при которой наблюдается переход металл–диэлектрик в гетероструктуре GaAs–GaAlAs [7].

сравнении значений n_0 при $n_c = 8 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$, что соответствует наблюдению спонтанной поляризации [12,15], и при $n_c = 1.0 \cdot 10^{11} \text{ cm}^{-2}$, когда сколь-либо существенных указаний на ферроупорядочение не было [9,16], мы обнаруживаем расхождение в два порядка. Эта разница в значениях n_0 , возможно, приводит к резкому снижению степени спиновой поляризации двумерного электронного газа вблизи перехода металл–диэлектрик в двумерной системе с более высоким значением n_c [9,16]. Тем не менее в этом случае остаточное влияние спиновой поляризации может отражаться в отклонениях температурных зависимостей спиновой восприимчивости от закона Кюри [14], проявляя тенденции двумерного электронного газа к суперпарамагнетизму. Однако подобное объяснение, основанное на совпадении критических значений концентрации носителей, соответствующих переходу металл–диэлектрик (n_c) и формированию их спонтанной спиновой поляризации (n_x) [12,15], находится в противоречии с данными исследований осцилляций Шубникова–де Гааза, которые не подтверждают наличия сколько-нибудь существенной спиновой поляризации носителей тока даже при $n_{2D} \approx 7.5 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ [9,16]. Вопрос о том, можно ли данный результат объяснить с позиций уменьшения значений n_0 вследствие большей разупорядоченности МОП структур, исследованных в [9,16], в сравнении с МОП структурами, которые изучались в [12,15], пока остается открытым. Поэтому возможная взаимосвязь критических концентраций n_c , n_x и n_0 требует дальнейшего исследования.

Авторы благодарят В.М. Пудалова за полезное обсуждение результатов работы.

Список литературы

- [1] S.V. Kravchenko, G.V. Kravchenko, J.E. Furneaux, V.M. Pudalov, M. D'Iorio. *Phys. Rev. B* **50**, 8039 (1994).
- [2] В.М. Пудалов. *УФН* **168**, 227 (1998).
- [3] А.М. Финкельштейн. *ЖЭТФ* **84**, 1, 168 (1983).
- [4] G. Zala, B.N. Narozhny, I.L. Aleiner. *Phys. Rev. B* **64**, 201 201 (2001).
- [5] E.A. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Licciardello, T.V. Ramakrishnan. *Phys. Rev. Lett.* **42**, 673 (1979).
- [6] P.T. Coleridge, R.L. Williams, Y. Feng, P. Zawadzki. *Phys. Rev. B* **56**, R12 764 (1997).
- [7] Y.Y. Proskuryakov, A.K. Savchenko, S.S. Safonov, M. Pepper, M.Y. Simmons, D.A. Ritchie. *Phys. Rev. Lett.* **89**, 076 406 (2002).
- [8] Y. Hanein, D. Shahar, C.C. Li, D.C. Tsui, H. Shtrikman. *Phys. Rev. B* **58**, R13 338 (1998).
- [9] V.M. Pudalov, M.E. Gershenson, H. Kojima, N. Busch, E.M. Dizhur, G. Brunthaler, A. Prinz, G. Bauer. *Phys. Rev. Lett.* **88**, 196 404 (2002).
- [10] L.E. Golub, S. Pedersen. *Cond-Mat/0205373v1*.
- [11] E.I. Rashba. *Journal of Superconductivity* **15**, 1 (2002).
- [12] A.A. Shashkin, S.V. Kravchenko, V.T. Dolgoplov, T.M. Klapwijk. *Phys. Rev. Lett.* **87**, 086 801 (2001).
- [13] S.A. Vitkalov, H. Zheng, K.M. Mertes, M.P. Sarachik, T.M. Klapwijk. *Phys. Rev. Lett.* **87**, 086 401 (2001).
- [14] O. Prus, Y. Yaish, M. Reznikov, U. Sivan, V.M. Pudalov. *Cond-Mat/0209142v1*.
- [15] S.V. Kravchenko, A.A. Shashkin, V.T. Dolgoplov. *Phys. Rev. Lett.* **89**, 219 701 (2002).
- [16] V.M. Pudalov, M.E. Gershenson, H. Kojima, N. Busch, E.M. Dizhur, G. Brunthaler, A. Prinz, G. Bauer. *Phys. Rev. Lett.* **89**, 219 702 (2002).
- [17] F. Stern. *Phys. Rev. Lett.* **30**, 278 (1973).
- [18] A.K. Rajagopal, J.C. Kimball. *Phys. Rev. B* **15**, 2819 (1977).
- [19] N. Iwamoto. *Phys. Rev. B* **43**, 2174 (1991).
- [20] R.S. Crandall, R.W. Williams. *Phys. Lett.* **A34**, 404 (1971).
- [21] P.M. Platzman, H. Fukuyama. *Phys. Rev. B* **10**, 3150 (1974).
- [22] H. Fukuyama, P.M. Platzman, P.W. Anderson. *Phys. Rev. B* **19**, 5211 (1979).
- [23] G. Senatore, S. Moroni, D. Varsano. *Sol. Stat. Commun.* **119**, 333 (2001).
- [24] B. Bernu, L. Candido, D.M. Ceperley. *Phys. Rev. Lett.* **86**, 870 (2001).
- [25] C. Attacalite, S. Moroni, P. Gori-Giorgi, G.B. Bachelet. *Phys. Rev. Lett.* **88**, 256 601 (2002).