

# ЗЕЕМАНОВСКОЕ РАСЩЕПЛЕНИЕ СОСТОЯНИЙ ТЯЖЕЛОЙ ДЫРКИ В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ $A_3B_5$ И $A_2B_6$

© A. AKиселев, L. B. Mouseev

Физико-технический институт им. А.Ф.Иоффе Российской академии наук,  
194021 Санкт-Петербург, Россия  
(Поступила в Редакцию 29 сентября 1995 г.)

В приближении многозонного метода плавных огибающих исследовано зеемановское расщепление состояний тяжелой дырки в квантовых ямах и сверхрешетках во внешнем магнитном поле. Рассчитаны зависимости дырочного  $g$ -фактора от параметров гетероструктуры, результаты сопоставлены с опубликованными экспериментальными данными.

Фактор Ланде спинового расщепления свободного электрона ( $g \approx 2$ ) описывает взаимодействие электронных состояний  $\pm 1/2$  с внешним магнитным полем. В твердых телах взаимодействие электронных состояний с потенциалом решетки приводит к существенной перенормировке значения  $g$ -фактора. В разных кристаллах константа спинового расщепления электронных состояний может достигать как очень больших положительных, так и отрицательных значений в хорошем соответствии с известной формулой Рот [1]. Эффекты размерного квантования значительно влияют на величину  $g$ -фактора в гетероструктурах [2]. В работе [3] была развита последовательная кр-теория, позволяющая рассчитывать электронный  $g$ -фактор в структуре с одиночной квантовой ямой (КЯ) или сверхрешетке (СР). Более того, было показано, что с учетом расщепления электронных состояний в подзонах тяжелых и легких дырок в валентной зоне из-за эффектов размерного квантования электронный  $g$ -фактор в зоне проводимости становится анизотропным.

Экспериментально исследовалось зеемановское расщепление как электронных, так и дырочных состояний в гетероструктурах. Методами поляризованной фотolumинесценции [2], оптически детектируемого магнитного резонанса [4,5] и комбинационного рассеяния с переворотом спина дырки на акцепторе [6] был измерен  $g$ -фактор размерно-квантованной тяжелой дырки в полупроводниковых гетероструктурах. В этих работах обнаружено существенное отличие измеренных значений дырочного  $g$ -фактора по сравнению с объемными.

В настоящей работе в рамках кр-метода исследовано зеемановское расщепление состояний тяжелой дырки в полупроводниковых гетероструктурах в магнитном поле, перпендикулярном интерфейсам, и рассчитаны зависимости  $g$ -фактора тяжелой дырки от параметров КЯ и

СР на примере структур GaAs/AlGaAs и CdTe/CdMgTe. Вычислены константы, определяющие перенормировку  $g$ -фактора при локализации дырочного состояния, что позволяет рассчитывать зеемановское расщепление дырки, связанной в экситоне, локализованной на примесях или неоднородностях интерфейса.

## 1. Электронные и дырочные состояния в гетероструктурах типа GaAs/AlGaAs

Задача определения спектра электронов в кристаллическом потенциале полупроводника наиболее просто решается в приближении метода эффективной массы. Впервые проблема расчета дисперсии вырожденных дырочных состояний в полупроводниках типа GaAs (зона  $\Gamma_8$ ) была рассмотрена Латтинжером. Точность расчета дырочных состояний в рамках гамильтониана Латтинжера определяется отношением энергии частицы, отсчитанной от потолка валентной зоны, к межзонному зазору. В широкозонных полупроводниках наименьшим межзонным энергетическим зазором является спин-орбитальное расщепление состояний зон  $\Gamma_8$  и  $\Gamma_7$ . Гамильтониан Латтинжера-Кона размерности  $6 \times 6$  дает последовательное теоретическое описание дырочных состояний, относящихся к этим зонам, однако учитывает взаимодействие валентных зон  $\Gamma_8$  и  $\Gamma_7$  с зоной проводимости  $\Gamma_6$  и далекими зонами лишь с точностью до квадратичных по  $k$  слагаемых. Заметим, что расчет зависимости  $g$ -фактора дырки (или электрона) от энергии состояния в гетероструктуре требует учета слагаемых четвертого порядка теории возмущений по волновому вектору  $k$  (см., например, [3]). Простая модель Кейна [7], последовательно и полностью учитываяющая  $kp$ -взаимодействие зон  $\Gamma_6$ ,  $\Gamma_8$  и  $\Gamma_7$ , дает неверный закон дисперсии для состояний тяжелой дырки, поскольку кривизна этой зоны определяется в основном взаимодействием с верхними зонами проводимости  $\Gamma_8 + \Gamma_7$ . Анализ преимуществ и недостатков различных модельных гамильтонианов приводит нас к необходимости использования при расчетах дырочного  $g$ -фактора полного  $kp$ -гамильтониана размерности  $8 \times 8$ , учитывающего взаимодействие зон  $\Gamma_6$ ,  $\Gamma_8$  и  $\Gamma_7$  точно, а вклад далеких зон в квадратичном по  $k$  приближении [8,9]. На рис. 1 введены следующие обозначения:  $E_g$  — ширина запрещенной зоны,  $\Delta$  — спин-орбитальное расщепление зон  $\Gamma_8$  и  $\Gamma_7$ , параметр  $E_p$  характеризует  $kp$ -взаимодействие состояний зоны проводимости и валентной зоны и связан с межзонным матричным элементом оператора импульса соотношением  $E_p = 2P^2$  (здесь и далее, если это особо не оговорено, мы используем атомную систему единиц:  $e = 1$ ,  $\hbar = 1$ ,  $m_0 = 1$ , где  $e$  — заряд электрона,  $\hbar$  — постоянная Планка,  $m_0$  — масса свободного электрона); параметр  $F$  определяет кривизну зоны проводимости, связанную с взаимодействием с далекими зонами,  $g^0$  —  $g$ -фактор электрона на дне зоны проводимости, перенормированный взаимодействием с далекими зонами. Модифицированные параметры Латтинжера  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$ ,  $\gamma_3$  и  $\kappa$  определяют влияние далеких зон на валентную зону ( $\Gamma_8 + \Gamma_7$ ) полупроводника и могут быть выражены через обычные латтинжеровские константы  $\gamma_i^L$  и  $\kappa^L$  (см. Приложение). Определяющий кубическое по  $J$  спиновое расщепление состояний валентной зоны параметр  $q$  является малым и в дальнейших выкладках опущен.

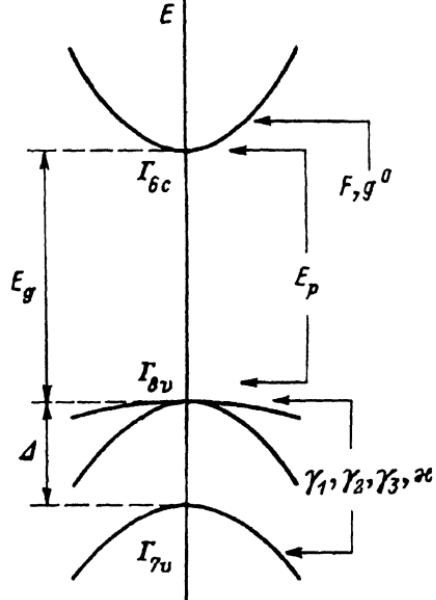


Рис. 1. Схематическое изображение зонной структуры полупроводников типа GaAs.

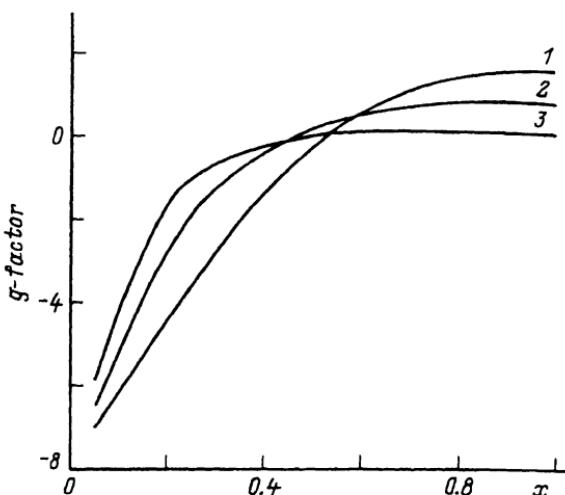


Рис. 2. Зависимость  $g$ -фактора тяжелой дырки на дне первой мини-зоны размерного квантования в СР  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  от состава твердого раствора.

Кривые 1-3 соответствуют толщинам слоев  $a = b = 30, 40, 50 \text{ \AA}$ .

С учетом реальной симметрии электронных состояний в СР и КЯ полные огибающие многокомпонентной волновой функции частицы могут быть факторизованы: движение вдоль слоев полупроводников является свободным, движение вдоль главной оси структуры  $z$  ограничено сверхструктурным потенциалом

$$F_j = e^{i(k_x x + k_y y)} f_j(z). \quad (1)$$

Рассмотрим изменения, которые следует внести в эффективный гамильтониан при наличии внешнего магнитного поля. Как было показано Латтинджером, модификация эффективного кр-гамильтониана при наличии поля сводится к замене  $k$  на  $k + A/c$ . Здесь  $A$  — вектор-потенциал магнитного поля,  $c$  — скорость света. Кроме того, слагаемые, соответствующие энергии электронного спина во внешнем поле, должны быть в явном виде добавлены в гамильтониан. Полные огибающие функции  $F_j$  теперь следует переписать в виде факторизованного произведения функций гармонического осциллятора  $\varphi_n$  и огибающих  $f_j(z)$ . Полная восьмикомпонентная волновая функция для данного уровня Ландау  $n$  может быть записана как [8,9].

$$\begin{aligned} \psi_n = & (f_1(z)\varphi_n f_2(z)\varphi_{n-1} f_3(z)\varphi_{n+1} f_4(z)\varphi_{n+1} \times \\ & \times f_5(z)\varphi_{n+1} f_6(z)\varphi_{n+2} f_7(z)\varphi_{n+2} f_8(z)\varphi_n). \end{aligned} \quad (2)$$

Индекс  $n$  пробегает значения  $n = -2, -1, 0, 1 \dots$ , причем функции  $f_j$  должны быть положены тождественно равными нулю при осцилляторных функциях  $\varphi_n$  с отрицательными индексами.

Полный гамильтониан должен быть переписан в терминах операторов уничтожения и рождения, после чего матричные элементы эффективного гамильтониана, действующего на столбец функций  $f_j$ , следует выразить в терминах матричных элементов гармонического осциллятора. Компоненты эффективного гамильтониана  $8 \times 8$  в присутствии внешнего магнитного поля выписаны нами в Приложении. Заметим, что в выбранном базисе (П.1) матрица гамильтониана симметрична  $H_{ij} = H_{ji}$ . Из гамильтониана исключены слагаемые, связанные с гофром валентной зоны и приводящие к смешиванию состояний с  $n$ , отличающимися на  $\pm 4$ . Последовательный учет этих слагаемых не имеет принципиальной трудности, однако требует работы с базисом большей размерности. В работах [10, 11] было показано, что изменения, привносимые данными слагаемыми в структуру уровней валентной зоны, относительно малы.

Система связанных дифференциальных уравнений второго порядка для функций  $f_j$  может быть представлена в виде

$$[kAk + (kB + Bk)/2 + C]f_j = \varepsilon f_j. \quad (3)$$

Здесь  $k \equiv -id/dz$ , компоненты матриц  $A$ ,  $B$  и  $C$  определяются видом эффективного гамильтониана и выражены через энергию границ зон, межзонный матричный элемент импульса, кейновский параметр зоны проводимости  $F$  и параметры  $\gamma_i$  и  $\chi$ . При переходе от объемного гамильтониана к гамильтониану гетероструктуры невозможно однозначно установить порядок умножения матричных операторов дифференцирования, определяющий граничные условия на интерфейсах гетероструктур. Единственным налагаемым требованием является эрмитовость гамильтониана. Неопределенность устраняется, например, широко используемой в литературе так называемой симметризацией гамильтониана, приводящей к системе уравнений (3). Требуя непрерывности огибающих  $f_j(z)$  и интегрируя уравнения (3) по области интерфейса, получим второе граничное условие — условие непрерывности комбинации  $(Ak + B/2)f_j$ . Если матрицы  $A$  и  $B$  материалов, составляющих гетероструктуру, одинаковы, то граничные условия системы уравнений сводятся к непрерывности функций и их производных. Причем никакой неоднозначности, связанной с порядком операторов в гамильтониане, не возникает.

Заметим, что последовательные методы построения гамильтониана электронных состояний в гетероструктуре однозначно определяют порядок операторов и, следовательно, набор граничных условий [12, 13].

Общим способом расчета электронных состояний в гетероструктурах, не связанным с конкретным видом многозонного гамильтониана, является метод трансфер-матрицы, или матрицы переноса (см., например, [9]). Его преимуществами являются концептуальная простота и легкость реализации численного алгоритма. В этом методе пространственное изменение электронной волновой функции в гетероструктуре определяется последовательным перемножением матриц переноса, соответствующих элементарным слоям. В случае, если в системе имеются экспоненциально растущие и/или экспоненциально затухающие

решения, что является обычным в задаче о туннелировании сквозь барьерные слои, элементы матрицы переноса становятся экспоненциально большими и/или экспоненциально малыми. Возникающая численная нестабильность предопределяет получение некорректных результатов из-за экспоненциального разрастания ошибок округления. Простые оценки показывают, что пределом применимости метода матрицы переноса являются структуры протяженностью  $\sim 5 \text{ \AA}$ , если в выбранной модели одновременно учитываются состояния как зоны проводимости, так и валентной зоны в относительно широкозонных материалах типа GaAs.

Причина использования формализма матрицы рассеяния вместо метода матрицы переноса состоит в том, что в процессе построения матрицы рассеяния нет необходимости применять специальные методы коррекции при работе с экспоненциально изменяющимися решениями. В качестве альтернативы при описании электронных состояний в многослойных структурах метод матрицы рассеяния оказывается стабильным и аккуратным во всех случаях. При этом подходе вместо представления электронных состояний на одной границе гетероструктуры через состояние на другой ее границе рассматриваются состояния, падающие на структуру, и их связь с состояниями, от структуры отраженными. В своих расчетах мы используем в качестве базового метод матрицы рассеяния. Рецепты построения матрицы рассеяния для случая сложных многозонных систем были подробно изложены в [14].

## 2. Результаты расчета $g$ -фактора тяжелой дырки

Внешнее магнитное поле снимает крамерово вырождение электронных и дырочных состояний в полупроводниковой гетероструктуре. В общем случае в малых полях это расщепление может быть записано в виде

$$\Delta E = \mu_B g H,$$

где коэффициент  $g$  имеет смысл эффективного  $g$ -фактора состояний.

В рамках модели, использующей полный гамильтониан размерности  $8 \times 8$ , при помощи метода матрицы рассеяния нами были рассчитаны диаграммы уровней Ландау для состояний дна первой мини-зоны размерного квантования тяжелой дырки в СР GaAs/AlGaAs в геометрии Фарадея. Значения зонных параметров, использованных при расчетах, приведены в табл. 1 [15].

Таблица 1  
Зонные параметры полупроводников GaAs и AlAs [15]

Соединение	$E_g, \text{ eV}$	$E_p, \text{ eV}$	$\Delta, \text{ eV}$	$\gamma_1^L$	$\gamma_2^L$	$\gamma_3^L$	$\kappa^L$
GaAs	1.519	28.9	0.341	6.85	2.10	2.90	1.20
AlAs	3.1	21.1	0.275	3.45	0.68	1.29	0.12

Для определения параметров твердых растворов  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  использовались следующие интерполяционные формулы: при  $x < 0.4$

$$E_g(x) = E_g(0) + 1.04x + 0.46x^2,$$

при  $x > 0.4$  для  $E_g(x)$ , а также при всех  $x$  для остальных параметров использовалась линейная интерполяция между параметрами чистых материалов GaAs и AlAs. Соотношение разрывов зон на интерфейсах было принято равным  $\Delta E_c/\Delta E_v = 3/2$  при  $x < 0.4$  и  $2/1$  для системы GaAs/AlAs. Все расчеты, представленные в данной работе, были выполнены при  $F = 0$ ,  $g^0 = 2$ . Проверка показала, что изменение этих величин оказывает исчезающее малое влияние на дырочный  $g$ -фактор.

Сильное взаимодействие и перемешивание дырочных состояний приводят к значительной нелинейности зависимостей энергии уровней Ландау от магнитного поля. Однако в малых полях, когда смешивание мало, эти зависимости оказываются близкими к линейным. Каждому номеру  $n$  в разложении (2) соответствуют две зависимости, которым можно сопоставить состояния дырки с проекциями момента  $\pm 3/2$  в малых магнитных полях. Номера основных осцилляторных функций, определяющих характер волновой функции дырочного состояния в плоскости  $xy$ , отличаются на три. Таким образом, из разложения по функциям гармонического осциллятора (2) следует, что спиновое расщепление состояний тяжелой дырки определяется разностью энергий  $E_n$  и  $E_{n-3}$ , при этом основные осцилляторные функции при блоховских амплитудах  $|2\rangle$  и  $|7\rangle$  оказываются одинаковыми. Таким образом, расщепление  $E_n - E_{n-3}$  не связано прямо с орбитальным квантованием.

Анализ зеемановского расщепления состояний тяжелой дырки на нескольких первых уровнях Ландау как функции внешнего магнитного поля  $B \parallel z$  показывает, что наклон всех линий в малых полях одинаков. Таким образом,  $g$ -фактор тяжелой дырки в гетероструктуре, полученный через зеемановское расщепление уровней в малых магнитных полях, есть хорошо определенная физическая характеристика данного дырочного состояния. В дальнейшем термин « $g$ -фактор» мы будем использовать именно в этом смысле. Подчеркнем, что эта величина сильно меняется при изменениях параметров гетероструктуры.

Рассчитанные зависимости  $g$ -фактора тяжелых дырок в СР GaAs/Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As от состава твердого раствора  $x$  представлены на рис. 2. При уменьшении доли Al в твердом растворе мы приближаемся к случаю объемного GaAs (однако со снятым вырождением легких и тяжелых дырок), при этом  $g_{hh} \rightarrow -6\chi^L = -7.2$ . Очевидно, сравнивать необходимо именно с этим случаем, поскольку даже при малой высоте барьера вырождение состояний тяжелой и легкой дырок в СР снято эффектами размерного квантования. Мы рассчитали также зависимость  $g$ -фактора тяжелой дырки в первой мини-зоне размерного квантования в СР GaAs/AlGaAs от сверхрешетчатого волнового вектора состояния. Эта зависимость не является следствием только изменения энергии дырочного состояния. Модификация граничных условий и структуры самого дырочного состояния ведет к существенной перенормировке его характеристик, включая и значение  $g$ -фактора. Отметим, что результаты расчета в соответствии с соображениями симметрии дают квадратичную зависимость  $g_{hh}$  от сверхрешеточного волнового вектора  $q$  в области малых  $q$ . Знание этой зависимости может быть использовано при расчетах  $g$ -фактора пространственно локализованных дырочных состояний (например, дырки в экситоне; дырки, связанные на акцепторе и т.д.).

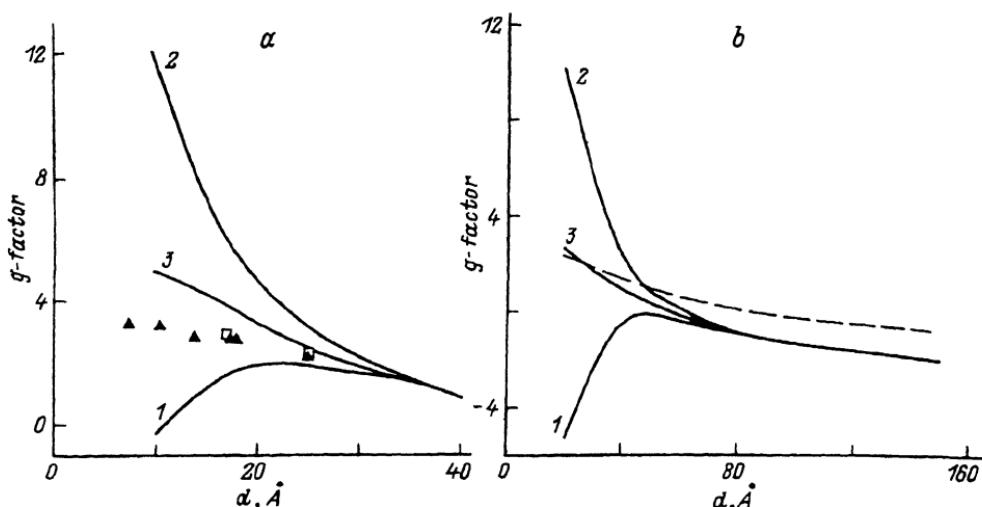


Рис. 3. Зависимость  $g$ -фактора тяжелой дырки в структуре  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  от толщины слоя  $d$  GaAs для параметра  $x = 1$  (a) и  $0.37$  (b).

Кривые 1 и 2 рассчитаны для состояний дырки на дне (1) и на границе (2) первой мини-зоны размерного квантования в СР с  $a = b$ . Кривая 3 получена для структуры с одиночной КЯ  $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}/\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ . Экспериментальные данные работ [4] и [5] представлены квадратами и треугольниками соответственно. Штриховая линия — экспериментальная зависимость  $g$ -фактора тяжелой дырки от толщины слоя КЯ [2].

Основные результаты расчета  $g$ -фактора свободной тяжелой дырки в гетероструктурах  $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$  приведены на рис. 3, a, b для  $x = 1$  и  $0.37$  соответственно. На нем представлен  $g$ -фактор тяжелой дырки в структуре как функция толщины слоя GaAs. Расчет выполнен для дырочных состояний на дне (кривые 1) и на границе (кривые 2) первой мини-зоны размерного квантования в СР с одинаковыми толщинами слоев КЯ и барьера. Результаты расчета  $g$ -фактора в структуре с одиночной КЯ представлены кривой 3 этого же рисунка. Эти зависимости оказываются очень резкими в области малых толщин слоев. Действительно, в таких структурах происходит сближение уровней тяжелой и легкой дырок. Магнитное поле смешивает эти состояния, что приводит к сильным нелинейностям зеемановского расщепления. Кривая 3 оказывается близкой к среднему арифметическому кривых 1 и 2, что свидетельствует о наличии аналога метода сильной связи, применяемого при расчете уровней в СР, и в теории  $g$ -фактора тяжелой дырки. Применимость этой аналогии простирается вплоть до ультратонких слоев, находящихся уже на грани применимости самого метода эффективной массы. При этом различие  $g$ -фактора на дне и на границе мини-зоны может быть гигантским, что, однако, практически не изменяет согласованного поведения кривых 1–3. Соответствие наших расчетов экспериментальным данным работ [2, 4, 5] оказывается достаточно хорошим. Некоторая модификация наших результатов может определяться, например, наличием экситонного эффекта. Учесть поправки к  $g$ -фактору, возникающие за счет локализации дырочного состояния, позволяют приведенные в разделе 3 рассуждения.

Таблица 2

Зонные параметры полупроводников CdTe и CdMgTe [15]

Соединение	$E_g$ , eV	$E_p$ , eV	$\Delta$ , eV	$\gamma_1$	$\gamma_2$	$\gamma_3$	$\kappa$
CdTe	1.606	21.0	0.949	0.94	-0.48	-0.18	-1.57
Cd <sub>0.7</sub> Mg <sub>0.3</sub> Te	2.112	21.0	0.949	0.94	-0.48	-0.18	-1.57

П р и м е ч а н и е. Заметим, что здесь в отличие от табл. 1 представлены модифицированные параметры валентной зоны  $\gamma_i$  и  $\kappa$ .

Для полупроводников A<sub>2</sub>B<sub>6</sub> зонные параметры известны значительно хуже, чем для полупроводников типа GaAs. Существующие же экспериментальные данные часто менее надежны и обнаруживают значительный разброс в значениях параметров. Сопоставление теории и эксперимента в конечном счете должно привести к уточнению этих значений.

Мы рассчитали зависимость  $g$ -фактора тяжелой дырки от толщины слоев для интенсивно изучаемых в настоящее время немагнитных гетероструктур CdTe/CdMgTe (рис. 4). Обозначения сплошных линий соответствуют принятым для рис. 3. Расчет выполнен для твердого раствора барьерных слоев Cd<sub>1-x</sub>Mg<sub>x</sub>Te с  $x = 0.3$ . Использованные значения параметров указаны в табл. 2 [15]. Для сравнительно слабо исследованных твердых растворов CdMgTe набор параметров выбран таким же, как и для CdTe. Все различие материалов ямы и барьера сведено таким образом к изменению ширины запрещенной зоны полупроводника (выбрано в соответствии с [16]). Соотношение разрывов зон на интерфейсах принято равным  $\Delta E_c/\Delta E_v = 7/3$  [17]. Наличие напряжения в структуре из-за рассогласования постоянных кристаллической решетки при расчете не учитывалось. Аналогичный расчет для структуры с одиночной КЯ был выполнен при альтернативном значении параметра  $\kappa = -1.83$  в CdTe [15] (штриховая линия на рис. 4). Как видно, результат меняется существенно, что могло бы быть использовано для более точного определения параметров CdTe из эксперимента.

### 3. Эффективный $g$ -фактор тяжелой дырки в сильных магнитных полях

Можно определить эффективный  $g$ -фактор состояния в больших полях, когда носители сильно локализованы, аналогично тому, как это было сделано для малых полей. Чтобы учесть проявляющиеся в больших полях нелинейности зеемановского расщепления, запишем разложение  $g$ -фактора по степеням волнового вектора дырки в СР ( $k_{\perp}, q$ )

$$g_{hh}^{\text{eff}} = g_{hh} + h_{\perp} k_{\perp}^2 + h_{\parallel} q^2 + \dots . \quad (4)$$

Для состояния  $N$ -го уровня Ландау с основной осцилляторной функцией  $\varphi_N$  ( $\varphi_{N+2}$  для  $|7\rangle$  и  $\varphi_{n-1}$  для  $|2\rangle$ ) верно следующее соотношение:

$$k_{\perp}^2 = 2(N + 1/2)B/c. \quad (5)$$

На рис. 5 представлена зависимость эффективного  $g$ -фактора от  $k_{\perp}^2$  для состояния тяжелой дырки на дне первой мини-зоны размерного

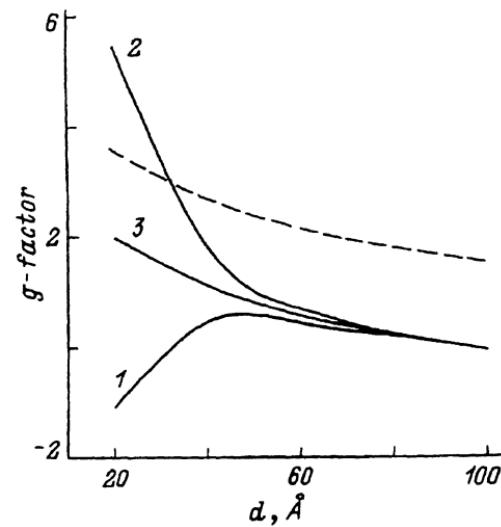


Рис. 4. Зависимость  $g$ -фактора тяжелой дырки в структуре  $\text{CdTe}/\text{Cd}_{0.7}\text{Mg}_{0.3}\text{Te}$  от толщины слоя  $d$   $\text{CdTe}$ . Обозначения сплошных линий соответствуют обозначениям рис. 3. Для случая одиночной КЯ расчет выполнен также при другом значении параметра  $\kappa = -1.83$  (штриховая линия).

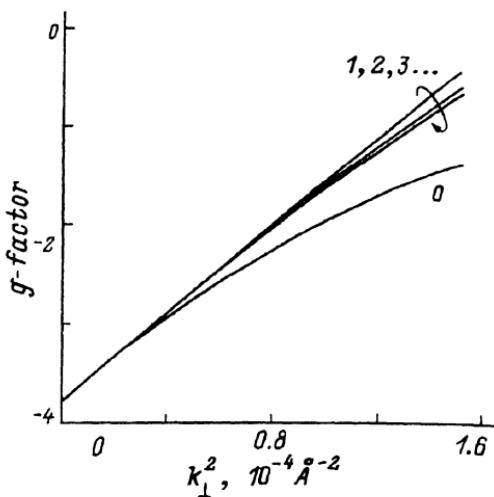


Рис. 5. Зависимость эффективного  $g$ -фактора тяжелой дырки от  $k_{\perp}^2$  для состояний на дне первой мини-зоны размерного квантования в СР  $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.37}\text{Ga}_{0.63}\text{As}$  с  $a = b = 20 \text{ \AA}$  для различных уровней Ландау.

квантования в СР  $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.37}\text{Ga}_{0.63}\text{As}$  с  $a = b = 20 \text{ \AA}$  для различных уровней Ландау с  $N = 0, 1, 2 \dots$ . В соответствии с разложением (4) все кривые имеют линейный участок в умеренных полях и наклоны всех кривых совпадают. Мы рассчитали значения констант  $h_{\perp}$  и  $h_{\parallel}$  для СР  $\text{GaAs}/\text{Al}_{0.37}\text{Ga}_{0.63}\text{As}$  с  $a = b = 20 \text{ \AA}$ :  $h_{\perp} = 2.8 \cdot 10^6 \text{ \AA}^{-2}$ ,  $h_{\parallel} = 2.5 \cdot 10^4 \text{ \AA}^{-2}$ . Обращает на себя внимание значительное различие коэффициентов  $h_{\perp}$  и  $h_{\parallel}$ . Это, однако, неудивительно, поскольку короткопериодная СР может рассматриваться как одноосный полупроводник с выраженной анизотропией. Кроме того, при  $\mathbf{B} \parallel z$  главная ось структуры дополнительно выделена внешним магнитным полем. По мере уменьшения проницаемости барьеров СР  $h_{\parallel} \rightarrow 0$ ; таким образом, в случае изолированных КЯ компонента разложения  $h_{\parallel}q^2$  в (4) отсутствует. Разложение (4) не зависит от типа внешнего воздействия, приводящего к появлению  $k_{\perp}$  и  $q$  у электронного или дырочного состояния. Следовательно, знание коэффициентов  $h_{\perp}$  и  $h_{\parallel}$  дает возможность расчета  $g$ -фактора дырки, связанной на акцепторе или в экзитоне, локализованной на неоднородностях интерфейсов, если усредненные по состоянию дырки  $\langle k_{\perp}^2 \rangle$  и  $\langle q^2 \rangle$  достаточно малы.

Выше исследовано влияние внешнего магнитного поля на структуру дырочных уровней в полупроводниковых гетероструктурах. Для этого был реализован устойчивый и эффективный алгоритм нахождения электронных и дырочных состояний в протяженных гетероструктурах в рамках многозонной модели методом матрицы рассеяния. Рассчитаны зависимости  $g$ -фактора тяжелой дырки от параметров СР и КЯ

для гетеросистем GaAs/AlGaAs и CdTe/CdMgTe, получено удовлетворительное согласие с экспериментом. Важно отметить радикальное отличие значений дырочного  $g$ -фактора в гетероструктурах от величины  $-6\mu^L$ , часто трактуемой в качестве эффективного  $g$ -фактора тяжелой дырки в объемном полупроводнике [2,4]. Лишь в предельных случаях значение  $g$ -фактора приближается к этой величине (см., например, рис. 2 и поясняющий текст).

Обычно экспериментальное значение дырочного  $g$ -фактора в гетероструктуре является результатом косвенного измерения. При этом необходимо знать прямо измеряемые значения экситонного  $g$ -фактора ( $g_{ex}$ ) и  $g$ -фактора электрона ( $g_e$ ), если считать верным соотношение  $g_{ex} = g_{hh} \mp g_e$  (для оптически активных и неактивных экситонов состояний соответственно). Причиной систематической погрешности такого подхода может быть различие значений  $g$ -фактора свободных и связанных электронных и дырочных состояний в гетероструктуре. Разработанная процедура расчета зеемановского расщепления связанных состояний допускает более последовательное сопоставление теории с прямыми экспериментальными данными по экситонам в гетероструктурах.

Авторы выражают искреннюю признательность Е.Л. Ивченко за интерес к работе и полезные дискуссии.

Работа была частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (код 95-02-06411a) и грантом INTAS-93-3657. Один из авторов (А.А.К.) благодарит за поддержку Международный научный фонд (грант NUB300).

## ПРИЛОЖЕНИЕ

Блоховские амплитуды  $|j\rangle$ , являющиеся собственными состояниями зоны проводимости и валентной зоны в точке  $\Gamma$ , выражаются через кейновские базисные функции  $S, X, Y, Z$  следующим образом:

$$\begin{aligned}|1\rangle &= |S \uparrow\rangle, & |5\rangle &= |S \downarrow\rangle, \\|2\rangle &= (-i/\sqrt{2})|(X + iY) \uparrow\rangle, & |6\rangle &= (-i/\sqrt{6})|(X + iY) \downarrow - 2Z \uparrow\rangle, \\|3\rangle &= (i/\sqrt{6})|(X - iY) \uparrow + 2Z \downarrow\rangle, & |7\rangle &= (i/\sqrt{2})|(X - iY) \downarrow\rangle, \\|4\rangle &= (-i\sqrt{3})(X - iY) \uparrow - Z \downarrow\rangle, & |8\rangle &= (-i\sqrt{3})(X + iY) \downarrow + Z \uparrow\rangle.\end{aligned}\quad (\Pi1)$$

Модифицированные параметры Латтинжера  $\gamma_i$  и  $\kappa$  определяют влияние далеких зон на валентную зону полупроводника ( $\Gamma_7 + \Gamma_8$ ) и могут быть выражены через обычные латтинжеровские константы  $\gamma_i^L$  и  $\kappa^L$  как

$$\begin{aligned}\gamma_1 &= \gamma_1^L - (E_p/3E_0), & \gamma_2 &= \gamma_2^L - (E_p/6E_g), \\&\gamma_3 = \gamma_3^L - (E_p/6E_g), & \kappa &= \kappa^L - (E_p/6E_g).\end{aligned}\quad (\Pi2)$$

Ниже приведены компоненты симметричной матрицы полного эффективного гамильтониана размерности  $8 \times 8$  для кубического полупроводника во внешнем магнитном поле, выписанные в базисе функций

гармонического осциллятора.

$$H_{11} = E_g + (F + (1/2))k^2 + (g^0/4S) + (F + (1/2))S(2n + 1),$$

$$H_{12} = P\sqrt{Sn}, \quad H_{13} = (-1/\sqrt{3})P\sqrt{S(n+1)},$$

$$H_{14} = \sqrt{2/3}P\sqrt{S(n+1)}, \quad H_{15} = 0,$$

$$H_{16} = -\sqrt{2/3}Pk, \quad H_{17} = 0, \quad H_{18} = (1/\sqrt{3})Pk;$$

$$H_{22} = (\gamma_2 - (1/2)\gamma_1)k^2 - (3/2)\varkappa S - (\gamma_2 + \gamma_1)S(n - (1/2)),$$

$$H_{23} = \sqrt{3}S\bar{\gamma}\sqrt{n(n+1)}, \quad H_{24} = -\sqrt{6}S\bar{\gamma}\sqrt{n(n+1)},$$

$$H_{25} = 0, \quad H_{26} = \sqrt{6}\gamma - 3\sqrt{Sn}k,$$

$$H_{27} = 0, \quad H_{28} = -\sqrt{3}\gamma_3\sqrt{Sn}k;$$

$$H_{33} = -((1/2)\gamma_1 + \gamma_2)k^2 + (1/2)\varkappa S - (\gamma_1 - \gamma_2)S(n + (3/2)),$$

$$H_{34} = -\sqrt{2}\gamma_2k^2 + (1/\sqrt{2})\gamma_2S(2n + 3) - (1/\sqrt{2})(\varkappa + 1)S,$$

$$H_{35} = -\sqrt{2/3}Pk, \quad H_{36} = 0,$$

$$H_{37} = -\sqrt{6}\gamma_3\sqrt{(n+2)Sk}, \quad H_{38} = 3\gamma_3\sqrt{(n+1)Sk};$$

$$H_{44} = -\Delta - (1/2)\gamma_1k^2 + (\varkappa + (1/2))S - \gamma_1S(n + (3/2)),$$

$$H_{45} = (-1/\sqrt{3})Pk, \quad H_{46} = 3\gamma_3\sqrt{S(n+1)k},$$

$$H_{47} = -\sqrt{3}\gamma_3\sqrt{S(n+2)}k, \quad H_{48} = 0;$$

$$H_{55} = E_g + (F + (1/2))k^2 - (g^0/4S) + (F + (1/2))S(2n + 3),$$

$$H_{56} = (1/\sqrt{3})P\sqrt{S(n+1)},$$

$$H_{57} = -P\sqrt{S(n+2)},$$

$$H_{58} = \sqrt{2/3}P\sqrt{S(n+1)};$$

$$H_{66} = -((1/2)\gamma_1 + \gamma_2)k^2 - (1/2)\varkappa S - (\gamma_1 - \gamma_2)S(n + (1/2)),$$

$$H_{67} = \sqrt{3}\bar{\gamma}S\sqrt{(n+1)(n+2)},$$

$$H_{68} = \sqrt{2}\gamma_2k^2 - (1/\sqrt{2})(\varkappa + 1)S - \sqrt{2}\gamma_2S(n + (1/2));$$

$$H_{77} = (\gamma_2 - (1/2)\gamma_1)k^2 + (3/2)\varkappa S - (\gamma_1 + \gamma_2)S(n + (5/2)),$$

$$H_{78} = \sqrt{6}\bar{\gamma}S\sqrt{(n+1)(n+2)};$$

$$H_{88} = -\Delta - (1/2)\gamma_1k^2 - (\varkappa + (1/2))S - \gamma_1S(n + (1/2)). \quad (\text{П3})$$

Здесь  $\bar{\gamma} = (\gamma_2 + \gamma_3)/2$ ,  $S = B/c$ . Из гамильтониана исключены слагаемые, связанные с гофром валентной зоны и приводящие к смешиванию состояний с  $n$ , различающимися на  $\pm 4$ . Волновой вектор состояния  $k$  направлен вдоль внешнего магнитного поля.

## Список литературы

- [1] Roth L.M., Lax B., Zerdling S. Phys. Rev. **114**, 90 (1959).
- [2] Snelling M.J., Blackwood E., McDonagh C.J., Harley R.T., Foxon C.T.B. Phys. Rev. **B45**, 3922 (1992).
- [3] Ивченко Е.Л., Киселев А.А. ФТП **26**, 8, 1471 (1992).
- [4] Van Kesteren H.W., Cosman E.C., van der Poel W.A.J.A., Foxon C.T. Phys. Rev. **41**, 5283 (1990).
- [5] Baranov P.G., Mashkov I.V., Romanov N.G., Lavallard P., Planell R. Solid State Commun. **87**, 649 (1993); Баранов П.Г., Романов Н.Г., Машков И.В., Хитрова Г.Б., Гиббс Х.М., Лунгнес О. ФТТ **37**, 10, 2991 (1995).
- [6] Sapega V.F., Cardona M., Ploog K., Ivchenko E.L., Mirlin D.N. Phys. Rev. **45**, 4320 (1992).
- [7] Kane E.O. J. Phys. Chem. Sol. **1**, 249 (1957).
- [8] Weiler M.H. In: Semiconductors and Semimetals / Ed. R.C. Willardson and A.C. Beer Academic. N. Y. (1981). V. 16. P. 119.
- [9] Ram-Mohan L.R., Yoo K.H., Aggarwal R.L. Phys. Rev. **38**, 6151 (1988).
- [10] Yang S.R., Broido D., Sham L.J. Phys. Rev. **32**, 6630 (1985).
- [11] Bangert E., Landwehr G. Surf. Sci. **170**, 593 (1986).
- [12] Burt M.G. J. Phys. Cond. Matter **4**, 6651 (1992).
- [13] Foreman B. Phys. Rev. **B48**, 4964 (1993).
- [14] Ko D.Y.K., Inkson J.C. Phys. Rev. **B38**, 9945 (1988).
- [15] Intrinsic Properties of Group IV Elements and III-V, II-VI and I-VII Compounds / Ed. O. Madelung. Springer-Verlag. Berlin (1987). Landolt-Börnstein. New Series. Group III, V. 22. Pt. a.
- [16] Ossau W., Zehnder U., Kuhn-Heinrich B., Waag A., Linz Th., Landwehr G., Hellmann R., Goebel E.O. Superlatt. Microstruct. **16**, 5 (1994).
- [17] Kuhn-Heinrich B., Ossau W., Heinke H., Fischer F., Linz T., Waag A., Landwehr G. Appl. Phys. Lett. **63**, 2932 (1993).