СПИНОВОЕ РАСЩЕПЛЕНИЕ ПОДЗОН РАЗМЕРНОГО КВАНТОВАНИЯ В НЕСИММЕТРИЧНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ

Герчиков Л. Г., Субашиев А. В.

Рассмотрено спиновое расщепление электронных и дырочных подзон размерного квантования для квазитреугольных потенциальных ям, образованных гетеропереходом и изгибом зон, локализующим носители вблизи гетероперехода. В рамках двухзонной модели Кейна найдена константа, определяющая линейное спиновое расщепление электронных подзон. Для кристалла с центром инверсии показано, что расщепление подзон тяжелых дырок оказывается порядка расстояния между ближайшими подзонами, пропорционально кубу волнового вектора дырок при малых его значениях и убывает при больших. Для кристаллов без центра инверсии сравнение найденных величин расщепления подзон с расщеплением спектра, индуцированным расщеплением в объемном кристалле, показало, что при малых толщинах аккумуляционных слоев расщепление, связанное с асимметрией ям, является преобладающим.

Введение. В несимметричных гетероструктурах кубических полупроводников происходит спиновое расщепление спектра носителей [1, 2], проявляющееся, например, в процессах спиновой релаксации [3], в магнитных [4] и фотогальванических явлениях [5] (см. также обзор [6]). Механизм спинового расщепления спектра двумерных электронов обсуждался в ряде работ [7–11], причем в одних предполагалось, что основной вклад в расщепление спектра дает взаимодействие с короткодействующим потенциалом гетерограницы [7, 8], в других же считалось, что оно обусловлено плавным электрическим полем потенциальной ямы, локализующей электроны [9, 10]. Поскольку в [11] отмечалась возможность полной компенсации этих вкладов, вопрос об их относительной величине и соотношении с расщеплением, которое индуцируется в полупроводниках без центра инверсии размерным квантованием [3, 5], требует дополнительного изучения.

Расщепление дырочных подзон размерного квантования обнаруживается в численных расчетах спектра гетероструктур [12, 13], однако аналитическое исследование этого явления отсутствует.

В настоящей работе теоретически исследовано расщепление подзон размерного квантования электронов и дырок полупроводника с узкой запрещенной зоной для квазитреугольных потенциальных ям, образованных гетеропереходом и изгибом зон, локализующим носители вблизи гетероперехода.

Эффективный гамильтониан двумерных электронов (или легких дырок) несимметричной гетероструктуры должен содержать линейное по волновому вектору $\mathbf{k}$ (при малых k) слагаемое вида [1–5]

$$V_{1c} = \alpha_c ([\mathbf{n} \times \mathbf{k}]\, \boldsymbol{\sigma}), \tag{1}$$

где $\mathbf{n}$ — единичный вектор нормали к гетерогранице, $\boldsymbol{\sigma}$ — спиновая матрица. Кроме того, в кристаллах без центра инверсии имеется кубическое по k спиновое расщепление объемного спектра легких носителей, которое индуцирует спин-зависящий линейный по k вклад в гамильтониан двумерных носителей [3-5]. Этот вклад может быть получен усреднением гамильтониана трехмерного кристалла по волновой функции движения в направлении нормали к гетерогранице. Для пленки кубического полупроводника с ориентацией нормали **n** $\|$ [001] этот вклад имеет вид

$$V'_{1c}=\beta_c(\sigma_x k_x-\sigma_y k_y). \tag{2}$$

Размерное квантование дырок в несимметричной яме кристалла с центром инверсии приводит к кубическому по k расщеплению подзонного спектра тяжелых дырок. Соответствующий эффективный гамильтониан может быть получен методом инвариантов. В приближении изотропного объемного спектра дырок эффективный гамильтониан двумерных тяжелых дырок можно записать в виде

$$V_{3v}=\alpha_v(\sigma_+k_-^3+\sigma_-k_+^3), \tag{3}$$

где $\sigma_\pm=\frac{1}{2}(\sigma_x\pm i\sigma_y)$ — комбинации псевдоматриц Паули, образующие базис неприводимого представления $m=3$ группы вращений вокруг направления **n**, $k_\pm=k_x\pm ik_y$. Помимо этого, в пленках и слоях кристаллов без центра инверсии спектр дырочных подзон размерного квантования содержит линейные и кубические по k слагаемые, происходящие из зависящих от ориентации полного момента линейных и кубических по k слагаемых гамильтониана валентной зоны $\hat{H}_v$ трехмерного кристалла [6].

В статье рассмотрены полупроводники с узкой запрещенной зоной, в которых основной вклад в дисперсию зон легких носителей и эффекты размерного квантования дает взаимодействие состояний валентной зоны и зоны проводимости. Поэтому спектр гетероструктуры может быть рассчитан в рамках двухзонной модели Кейна [6], учитывающей состояния зоны проводимости Γ_6 и валентной зоны, которая в результате спин-орбитального взаимодействия расщепляется на зоны Γ_8 и Γ_7. В том же приближении гетеропереход можно описывать как предельный случай варизонного слоя малой толщины. В рамках двухзонной модели спиновое расщепление электронных подзон обусловлено виртуальными переходами в ближайшую (валентную) зону, расщепленную спин-орбитальным взаимодействием, и описывается гамильтонианом вида (1). В работе вычислена константа расщепления α_c для квазитреугольной ямы и проведено ее сравнение с константой β_c из (2), оцененной через параметры трехмерного кристалла [6].

Рассмотрение спектра двумерных тяжелых дырок показывает, что основной вклад в расщепление дырочного спектра несимметричных гетероструктур связан с перемешиванием состояний легких и тяжелых дырок в потенциале ямы и имеет вид (3). Относительная величина расщепления подзон может быть большой ввиду сильного влияния спин-орбитального взаимодействия на состояния дырок. В работе рассмотрена зависимость расщепления спектра от величины k и проведено сравнение константы расщепления α с константами, определяющими спиновое расщепление спектра, индуцированное расщеплением спектра объемного кристалла. Полученные результаты объясняют особенности спектра дырок, наблюдаемые в численных расчетах [12, 13].

1. Спектр двумерных электронов

Для описания состояний будем использовать изотропную модель Кейна, считая, что положения дна зон Γ_6, Γ_8 и Γ_7 зависят от координаты x, $Ox \parallel$ **n**.[1] Матричный гамильтониан модели Кейна (8×8) коммутирует с оператором зер-

[1] В отличие от *Введения*, здесь и далее ось квантования z удобно выбрать в плоскости гетероперехода, а ось x направить перпендикулярно гетерогранице.

кальной четности $\mathscr{P}$ [14], который в изотропном приближении сводится к отражению относительно плоскости движения, образуемой векторами **n** и **k**:

$$\mathscr{P} = -i\hat{I}e^{i\pi[\mathbf{n}\times\mathbf{k}]\hat{\mathbf{S}})/|\mathbf{k}|}, \tag{4}$$

где $\hat{I}$ — оператор инверсии, $\hat{\mathrm{S}}$ — оператор собственного момента носителей, который для зон Γ_6 и Γ_7 совпадает с оператором спина $\hat{\mathrm{S}}=\frac{1}{2}\hat{\sigma}$, а для зоны Γ_8 — с оператором полного момента $\hat{\mathrm{J}}$ $\mathrm{J}=3/2$. Выберем за ось квантования z направление, перпендикулярное плоскости движения $Oz \parallel [\mathbf{n}\times\mathbf{k}]$, $k=k_y$. Тогда значению зеркальной четности $\mathscr{P}=1$ соответствуют состояния зон со следующими значениями проекции момента на ось z: Γ_6 (1/2), Γ_8 (—1/2, 3/2), Γ_7 (—1/2). Состояния с противоположными значениями S_z соответствуют $\mathscr{P}=-1$. В этом представлении гамильтониан Кейна разбивается на две подматрицы, одна из которых (для $\mathscr{P}=1$) имеет вид

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \varepsilon_c(x) & \frac{pk_-}{\sqrt{6}} & \frac{pk_+}{\sqrt{2}} & -i\frac{pk_-}{\sqrt{3}} \\ \frac{pk_+}{\sqrt{6}} & \varepsilon_v(x) - k_+(\gamma - \tilde{\gamma})k_- & -\sqrt{3}\,k_+\tilde{\gamma}k_+ & i\sqrt{2}\,k_+\tilde{\gamma}k_- \\ \frac{pk_-}{\sqrt{2}} & -\sqrt{3}\,k_-\tilde{\gamma}k_- & \varepsilon_v(x) - k_-(\gamma + \tilde{\gamma})k_+ & i\sqrt{6}\,k_+\tilde{\gamma}k_+ \\ i\frac{pk_+}{\sqrt{3}} & -i\sqrt{2}\,k_-\tilde{\gamma}k_+ & -i\sqrt{6}\,k_-\tilde{\gamma}k_- & \varepsilon_v - \Delta - k_+\gamma k_- \end{pmatrix}. \tag{5}$$

Здесь $k_\pm = -i\left(\frac{\partial}{\partial x} \mp k\right)$, p — кейновский матричный элемент, γ, $\tilde{\gamma}$ — константы Латтинжера. Для состояний с $\mathscr{P}=-1$ гамильтониан отличается заменой $k \to -k$. В пределах слоя однородного материала параметры гамильтониана (5) p, γ, $\tilde{\gamma}$, Δ и $\varepsilon_g=\varepsilon_c-\varepsilon_v$ остаются постоянными. В области гетероперехода величины ε_c, ε_v, Δ, γ, $\tilde{\gamma}$ меняются как функции x от своих значений в материале 1 до значений в материале 2. Будем предполагать, что величина электрического поля в яме такова, что выполняется неравенство $\varepsilon_d/\varepsilon_g \ll 1$, где $\varepsilon_d=(e^2E^2\hbar^2/2m_e)^{1/3}$ — характерная энергия размерного квантования, m_e — масса электронов, соответствующая гамильтониану (5). Тогда при рассмотрении электронных состояний с точностью до малых $\sim\varepsilon_d/\varepsilon_g$ поправок квадратичными по k слагаемыми в (5) можно пренебречь. После этого матричное уравнение Шредингера разрешается относительно электронной компоненты и принимает вид

$$\left[-\frac{\partial}{\partial x}\frac{\hbar^2}{2m_e(x)}\frac{\partial}{\partial x} + \frac{\hbar^2k^2}{2m_e(x)} - k\frac{\partial\chi_c}{\partial x}\right]\psi(k,\ x) = [\varepsilon - \varepsilon_c(x)]\,\psi(k,\ x), \tag{6}$$

где $m_e(x)$ — электронная масса, зависящая от координаты

$$m_e^{-1}(x) = \frac{2p\,[3\,(\varepsilon - \varepsilon_v(x)) + 2\Delta(x)]}{3\hbar^2\,[\varepsilon - \varepsilon_v(x)]\,[\varepsilon - \varepsilon_v(x) + \Delta(x)]}, \tag{7}$$

и

$$\chi_c = \frac{p^2\Delta(x)}{3\,[\varepsilon - \varepsilon_v(x)]\,[\varepsilon - \varepsilon_v(x) + \Delta(x)]}. \tag{8}$$

Последнее слагаемое в скобках левой части уравнения (6) играет роль эффективного оператора спин-орбитального взаимодействия и может быть записано в виде

$$\hat{V}_{1c} = ([\mathbf{k}\times\nabla\chi_c]\,\sigma). \tag{9}$$

Как следует из (8) и (9), в объемном материале взаимодействие $\hat{V}_{1c}$ обусловлено эффектами непараболичности, а именно зависимостью χ_c от $\varepsilon-\varepsilon_r(x)$. При $\varepsilon_d \ll \varepsilon_g$ величина $\hat{V}_{1c}$ пропорциональна электрическому полю:

$$\hat{V}_{1c} = -e\,\frac{\partial \chi_c}{\partial \varepsilon}\,([\mathbf{k}\times\mathbf{E}]\,\boldsymbol{\sigma}). \tag{10}$$

В области резкого гетероперехода при $x=x_0$ взаимодействие $\hat{V}_{1c}$ можно записать в виде

$$\hat{V}_{1c} = ([\mathbf{k}\times\mathbf{n}]\,\boldsymbol{\sigma})\,[\chi_c(x_0+\delta)-\chi_c(x_0-\delta)]\,\delta(x-x_0), \tag{11}$$

соответствующем наличию на гетерогранице δ-образного потенциала [7, 8]. Отметим, что при конечных k мощность этого потенциала может оказаться достаточной для образования связанных пограничных состояний [15]. Из (8)—(11) следует, что при $\varepsilon-\varepsilon_c \ll \varepsilon_g$ спиновое расщепление электронных подзон оказывается линейным по k, а соответствующий эффективный гамильтониан двумерных электронов имеет вид (1), причем константу $\alpha_c^{(n)}$ для подзоны размерного квантования с номером n можно найти усреднением оператора $\hat{V}_{1c}$ из (9) по волновой функции движения электрона в нормальном к гетерогранице направлении.

Ввиду громоздкости получающихся элементарных формул приведем выражение для константы α_c для треугольной ямы, образованной электростатическим потенциалом $\varphi=-Ex$ в материале 1 и ограниченной при $x=0$ высоким барьером гетероперехода, разделяющим материал 1 с материалом 2. Используя (8)—(11), получим

$$\alpha_c = -\frac{eE\hbar^2\Delta\,(\varepsilon_{g1}+\Delta/2)}{m_e(0)\,\varepsilon_{g1}(\varepsilon_{g1}+\Delta)(3\varepsilon_{g1}+2\Delta)}\left(1+\frac{\left(\varepsilon_{g1}+\frac{2}{3}\Delta\right)(2\varepsilon_{g1}+\Lambda_v+\Delta)\,\Lambda_v}{\left(\varepsilon_{g1}+\Lambda_v+\frac{2}{3}\Delta\right)(2\varepsilon_{g1}+\Delta)\,\Lambda_c}\right). \tag{12}$$

Здесь $\Lambda_c=\varepsilon_{c2}-\varepsilon_{c1}$, $\Lambda_v=\varepsilon_{v1}-\varepsilon_{v2}$ — величины разрывов зон проводимости и валентной зоны на гетеропереходе, $\Lambda_c+\Lambda_v=\varepsilon_{g2}-\varepsilon_{g1}$. Для простоты в (12) считается, что $\Delta_1=\Delta_2=\Delta$. Выражение (12) получено в низшем приближении по ε_d/Λ_c и не зависит от n. Первое слагаемое в (12) соответствует вкладу в расщепление области движения электрона внутри ямы, второе, пропорциональное отношению Λ_v/Λ_c, — вкладу гетерограницы. В общем случае оба вклада оказываются одного порядка величины, при $\Lambda_v/\Lambda_c<0$ происходит их частичная компенсация. В частности, при $\Delta \gg \varepsilon_g$ и $\Lambda_v=-\Lambda_c$ (т. е. при $\varepsilon_{g1}=\varepsilon_{g2}$) компенсация оказывается полной. При $|\Lambda_v| \gg |\Lambda_c|$ вклад гетерограницы в расщепление спектра становится определяющим.

Отметим, что при финитном движении электрона в потенциальном поле произвольной формы ($\varepsilon_g=\mathrm{const}$) спиновое расщепление типа (1), (9) в пределе $\Delta \gg \varepsilon_g$ (и $\Delta \to 0$) отсутствует. При $\Delta \sim \varepsilon_g$ спиновое расщепление в поле $U(x)$ отлично от нуля, хотя его величина оказывается более высокого порядка малости по параметру $(\varepsilon-\varepsilon_c)/\varepsilon_g$, чем (12). Действительно, согласно (9), коэффициент α_c пропорционален среднему значению dU/dx, а в нулевом приближении по $(\varepsilon-\varepsilon_c)/\varepsilon_g$

$$\int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx\,\frac{dU}{dx}\,|\psi|^2 = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\int\limits_{-\infty}^{+\infty} d\,|\psi'|^2 = 0.$$

Помимо расщепления электронного спектра (1), связанного с виртуальными переходами электронов в валентную зону, в пленках кристаллов без центра инверсии возникает линейное по k расщепление спектра типа (2), индуцированное размерным квантованием. Соответствующая константа β_c для n-ой подзоны оказывается равной $\beta_c = \frac{2}{3} m_e \varepsilon_n \gamma_c / \hbar^2$, где γ_c — константа кубического расщепления спектра электронов в трехмерном кристалле, выраженная в [6] через параметры трехзонной модели, ε_n — энергия n-го уровня размерного квантования. В [6] показано, что константа γ_c отлична от нуля только при учете переходов в удаленную зону проводимости Γ_{15}, и потому пропорциональна (по сравнению с α_c) дополнительному малому множителю, близкому по порядку величины к отношению масс легких и тяжелых дырок ($\mu = m_l/m_h$). Поэтому для отношения α_c/β_c имеем $\alpha_c/\beta_c \sim (\varepsilon_d/\varepsilon_g)^{1/2}/\mu$. Численные оценки показывают, что для узкозонных полупроводниковых кристаллов, например для InSb, GaSb, константа α_c сравнивается с β_c при толщине аккумуляционного слоя $d \leqslant 300$ Å.

2. Спектр дырочных подзон

Рассмотрим спиновое расщепление спектра размерного квантования дырок валентной зоны Γ_8. В области малых энергий дырок $|\varepsilon - \varepsilon_v| \ll \varepsilon_g$ при рассмотрении дырочного спектра удобно исключить из матричного уравнения Шредингера с гамильтонианом (5) электронную компоненту, после чего оно сводится к уравнению с гамильтонианом Латтинжера, параметры которого зависят от координаты x. В частности, та часть констант Латтинжера, которая обусловлена взаимодействием с зоной Γ_6, зависит от разности $\varepsilon - \varepsilon_c(x)$. Соответствующие слагаемые в гамильтониане, ответственные за расщепление, при малых k можно записать в виде, аналогичном (8):

$$\hat{V}_{1v} = ([\mathbf{k} \times \nabla \chi_v]\, \mathbf{J}), \tag{13}$$

где $\chi_v = -p^2/[3(\varepsilon - \varepsilon_v(x))]$. Для нахождения расщепления следует усреднить оператор $\hat{V}_{1v}$ по волновым функциям состояний с $k=0$. При $k=0$ движение легких и тяжелых дырок происходит независимо, что определяет универсальный вид спинорных частей соответствующих волновых функций. Усреднение (13) по волновым функциям легких дырок показывает, что расщепление подзон легких дырок происходит подобно расщеплению электронного спектра, т. е. линейно при малых k, и описывается гамильтонианом вида (1). Однако поскольку $\chi_v \sim \chi_c (\varepsilon_g + \Delta)/\Delta$, оно может быть существенно бо́льшим по величине.

Среднее от оператора $\hat{V}_{1v}$ по волновым функциям тяжелых дырок

$$\psi_h = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ -1 \end{pmatrix} \Phi_h(x)$$

равно нулю. Соответственно линейное расщепление спектра тяжелых дырок в модели Латтинжера (т. е. для кристалла с центром инверсии) отсутствует. Спиновое расщепление спектра тяжелых дырок возникает в кубических по k членах за счет перемешивания состояний с различными проекциями момента 3/2 и −1/2 на направление $[\mathbf{n} \times \mathbf{k}]$. В отличие от механизма расщепления типа (9), (13), связанного с непараболичностью спектра носителей, взаимодействие дырочных состояний имеет место и при $\varepsilon - \varepsilon_v \to 0$, поэтому соответствующий механизм расщепления можно описать гамильтонианом Латтинжера, в котором константы γ, $\tilde{\gamma}$ считать не зависящими от x. Для нахождения расщепления при малых k достаточно использовать обычную теорию возмущений, используя в качестве нулевого приближения $\hat{H}_0 = \hat{H}(k=0) \equiv \hat{H}(0)$, а в качестве возмущения — $\delta\hat{H} = \hat{H}(k) - \hat{H}(0)$, так как состояния с определенными значениями зеркальной четности невырождены. Имеем

$$\varepsilon_{hn}(k)=\varepsilon_{hn}+\langle\psi_{hn}|\delta\hat{H}|\psi_{hn}\rangle+\sum_{m}\frac{|\langle\psi_{lm}|\delta\hat{H}|\psi_{hn}\rangle|^2}{\varepsilon_{hn}-\varepsilon_{lm}}, \tag{14}$$

где ε_{hn}, ε_{lm} — положения краев подзон легких и тяжелых дырок при $k=0$, ψ_{hn}, ψ_{lm} — соответствующие им волновые функции. Для вычисления (14) выразим поправку второго порядка через координатную часть функции Грина нулевого приближения по $\delta\hat{H}$ для легких дырок $G(\varepsilon, x_1, x_2)=\sum\limits_m \Phi_{lm}(x_1)\Phi_{lm}(x_2)/(\varepsilon-\varepsilon_{lm})$. Тогда

$$\varepsilon_{hn}(k)=\varepsilon_{hn}-(\gamma+\tilde{\gamma})k^2-12\tilde{\gamma}^2\int\int_{-\infty}^{+\infty}dx_1dx_2\psi_{hn}(x_1)\times$$

$$\times\left(k\frac{\partial}{\partial x_1}+\frac{k^2}{2}\right)G(\varepsilon_{hn}, x_1, x_2)\left(k\frac{\partial}{\partial x_2}-\frac{k^2}{2}\right)\psi_{hn}(x_2). \tag{15}$$

Дальнейшие вычисления проведем так же, как и в разделе 1 для случая треугольной ямы $[\varepsilon_v(x)=-eEx]$, ограниченной при $x=0$ высоким барьером, считая малым отношение масс легких и тяжелых дырок ($\mu\ll 1$). При $\mu\ll 1$ энергия нижних подзон тяжелых дырок существенно меньше энергии легких дырок $\varepsilon_{lm}\sim\mu^{1/3}\varepsilon_{hn}$, поэтому в области малых энергий с точностью до членов $\sim\mu^{1/3}$ из уравнения Шредингера для легких дырок следует

$$G(\varepsilon, x_1, x_2)=\frac{2m_l}{\hbar^2}x;\ x=\min(x_1, x_2). \tag{16}$$

Подставляя (16) в (15), получим выражение для константы расщепления подзон тяжелых дырок из (3)

$$\alpha_v^{(n)}=\frac{3}{8}\frac{\hbar^2}{m_l}\left(\frac{\hbar^2}{2m_heE}\right)^{1/3}I_n, \tag{17}$$

где J_n — безразмерные постоянные, выражающиеся через интегралы от функции Эйри Ai (z):

$$I_n=\frac{\left[\int\limits_0^\infty dz\,\mathrm{Ai}\,(-z-a_{n+1})\right]^2}{\int\limits_0^\infty dz\,\mathrm{Ai}^2\,(-z-a_{n+1})}, \tag{18}$$

$\mathrm{Ai}(-\alpha_n)=0$, $n=1, 2, 3\ \ldots$, $J_1\simeq 1.8$, $J_2\simeq 0.5$.
Таким образом, при малых k $\delta\varepsilon_{hn}=\pm\alpha_v^{(n)}k^3$ и относительное расщепление спектра оказывается порядка $\delta\varepsilon_{hn}/\varepsilon_{gn}\simeq(k/q_n)^3/\mu$, $q_h=(2m_heE/\hbar^2)^{1/3}$.

Хотя описать расщепление спектра подзон тяжелых дырок при произвольных значениях k не представляется возможным, уже при $k\gg q_l=(2m_leE/\hbar^2)^{1/3}=\mu^{1/3}q_h$ вероятность взаимных превращений тяжелых и легких дырок в электрическом поле становится малой [13, 15], что позволяет рассматривать движение легких и тяжелых частиц в яме независимо. При конечных k волновая функция состояний представляет собой суперпозицию функций легких и тяжелых дырок с определенной энергией, удовлетворяющую граничным условиям. В рассматриваемой области энергий тяжелых дырок волновая функция легких дырок имеет вид быстро затухающей в глубь ямы волны с декрементом затухания $\varkappa\simeq k$ и с точностью $(q_l/k)^3$ сводится к волновой функции свободной дырки

$$\psi_l=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}\frac{\varkappa+k}{\varkappa-k}\\ \sqrt{3}\end{pmatrix}e^{-\varkappa x+iky}. \tag{19}$$

Волновую функцию тяжелых дырок удобно находить в импульсном представлении в виде интеграла Фурье:

$$\psi_h = \int_{-\infty}^{+\infty} dq C(q) \varphi_h(q, k) e^{i(qx+ky)}. \tag{20}$$

Здесь

$$\varphi_h(k, q) = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \sqrt{3}\, \dfrac{q+ik}{q-ik} \\ -1 \end{pmatrix}, \tag{21}$$

а амплитуда $C(q)$ удовлетворяет уравнению [16]

$$ieE \frac{d}{dq} C(q) + \left(\varepsilon + \frac{\hbar^2 (q^2+k^2)}{2m_h}\right) C(q) - ieE \left\langle \varphi_h(q, k) \left| \frac{\partial}{\partial q} \right| \varphi_h(q, k) \right\rangle C(q) = 0. \tag{22}$$

В (22) опущены члены, описывающие превращение тяжелых дырок в легкие в электрическом поле ямы, существенные при малых импульсах $k \leqslant q_l$. Спиновое расщепление подзон обусловлено последним слагаемым в правой части уравнения (22) и связано с изменением спинорной части волновой функции тяжелых дырок (21) при их движении в поле.[2] Решение уравнения (22) имеет вид [16]

$$C(q) = \left(\frac{q+ik}{q-ik}\right)^{-3/4} e^{\frac{i}{eE}\left(\frac{\hbar^3 q^3}{6m_h} + \left(\varepsilon + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h}\right) q\right)}. \tag{23}$$

В случае высокого барьера при $x=0$ граничное условие сводится к равенству нулю волновой функции

$$\psi = c_l \psi_l + c_h \psi_h |_{x=0} = 0. \tag{24}$$

Условие (24) при подстановке в него (19)—(23) дает систему двух однородных уравнений для c_l, c_h, имеющую отличное от нуля решение при выполнении условия квантования, которое имеет достаточно простой вид в нулевом приближении по μ, когда $\varkappa - k \ll k$:

$$\int_0^\infty dq \cos\left(\frac{\hbar^2 q^3}{6m_h eE} + \frac{q}{eE}\left(\varepsilon + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h}\right) + \left(1 \pm \frac{1}{2}\right) \operatorname{arctg} \frac{q}{k}\right). \tag{25}$$

В (25) величина k считается положительной, а знаки $\pm$ соответствуют двум состояниям с различными значениями зеркальной четности $\mathscr{P} = \pm 1$. Из (25) следует, что максимальное спиновое расщепление возникает в области $\mu^{1/3} q_h \leqslant k \leqslant q_h$, где оно оказывается порядка расстояния между уровнями размерного квантования тяжелых дырок (фазы волновых функций расщепленных состояний отличаются на величину $\sim\pi$). Это объясняется тем, что при $k \leqslant q_h$ при движении тяжелой дырки в поле ямы происходит наиболее сильное изменение спинорной части волновой функции, описываемое последним слагаемым в правой части уравнения (22). В области больших $k \gg q_h$ из (25) следует

$$\varepsilon_{hn}(k) = \varepsilon_{s1} - \varepsilon_{hn} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h} - \left(1 + \frac{1}{2}\right) \frac{eE}{k}, \tag{26}$$

где $\varepsilon_{hn} = \alpha_n (e^2 E^2 \hbar^2 / 2m_h)^{1/3}$. Согласно (26), при $k \to \infty$ спиновое расщепление стремится к нулю. В этой области k момент дырки ориентирован вдоль плоско-

---

[2] Отметим, что подстановка в (22) вместо φ_h собственного вектора гамильтониана (5), соответствующего электронному состоянию, приводит к эффективному оператору спинового расщепления (9).

сти гетерограницы и спинор $\varphi_h(q, k)$ слабо меняется при движении по нормали к гетеропереходу.

Для возбужденных состояний тяжелой дырки с $n \gg 1$ интеграл в (25) можно вычислить в квазиклассическом приближении, откуда следует выражение

$$\varepsilon_{hn}(k) = \varepsilon_{v1} - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_h} - \frac{1}{2m_h} - \frac{1}{2m_h} \times$$
$$\times \left\{ 3\pi\hbar e E m_h \left[n + \frac{3}{4} + \left(1 \pm \frac{1}{2}\right) \frac{1}{\pi} \operatorname{arctg} \left(\frac{3\pi e E m_h}{\hbar^2 k^3} \right)^{1/3} \right] \right\}, \quad (27)$$

справедливое в более широкой, чем (26), области импульсов $k \gg \mu^{1/3} q_h$ и подтверждающее качественный анализ уравнения (25). В отличие от случая электронного спектра вклад области гетерограницы в расщепление спектра тяжелых дырок, как видно, например, из (15), мал, так как пропорционален толщине переходного слоя. Более существенным для спинового расщепления в яме конечной глубины является прохождение дырки под барьер. Оценку соответствующего вклада в расщепление можно получить, заменяя нулевое граничное условие (24) на условие отражения от барьера конечной высоты Λ_v (элементы матрицы отражения приведены в [17]). Согласно [17], максимальное различие изменения фазы волновой функции дырки при отражении от барьера высоты Λ_v для двух ориентаций момента достигает (при $k \sim q_h \sim \sqrt{2m_h \Lambda_v}/\hbar) \sim \pi$, поэтому максимальное расщепление подзон, связанное с отражением от барьера, может оказаться того же порядка, что и расщепление за счет движения дырки в поле внутри ямы.

Описанные выше качественные особенности спектра размерного квантования дырок в треугольной яме, а именно линейное спиновое расщепление подзон легких дырок и кубическое расщепление подзон тяжелых дырок, большое ($\sim \varepsilon_{hn}$) расщепление спектра при $k \sim q_h$ и убывание расщепления при $k \gg q_h$, согласуются с результатами численных расчетов [12, 13].

В кристаллах без центра инверсии, помимо спинового расщепления спектра, обусловленного асимметрией ямы, имеется спиновое расщепление, связанное с уже имеющимся расщеплением спектра дырок трехмерного кристалла [6], которое модифицируется при двумерном движении дырок. Относительную величину вкладов различных механизмов в расщепление можно оценить следующим образом.

Линейное по k расщепление дырочного спектра объемного кристалла $\delta\varepsilon_{1v} \simeq \ell_0 k$ [6, 18] приводит к такому же расщеплению спектра подзон размерного квантования, причем константа ℓ_0 для кристаллов $\mathrm{A^{III}B^{V}}$ не превосходит 10 мэВ·Å. Рассмотренное выше расщепление (17) оказывается преобладающим при $k \gg k_1$, где $k_1 = (q_h k_0 \mu)^{1/2}$, k_0 — волновой вектор центра смещенного экстремума спектра тяжелых дырок ($k_0 = m_h \ell_0/\hbar^2$, $k_1 \ll q_h \mu^{1/3}$).

Далее, гамильтониан объемного кристалла содержит кубические по слагаемым, приводящие к спиновому расщеплению $\delta\varepsilon_{3v} = \gamma_v k^3$, причем константа $\gamma_v \sim \hbar^2 a_0/m_l$, a_0 — постоянная решетки [6]. Сравнение с (17) дает $\delta\varepsilon_{hn}/\delta\varepsilon_{3v} \simeq$ $\simeq \alpha_v^{(n)}/\gamma_v \sim (q_h a_0)^{-1} \gg 1$. Кроме того, расщепление $\delta\varepsilon_{3v}$ индуцирует линейное по k расщепление, связанное с размерным квантованием и имеющее порядок величины $\delta\varepsilon_{3v}^i \sim \gamma_v q_h^2 k$. Расщепление (17) превосходит индуцированное расщепление $\delta\varepsilon_{3i}^i$ при $k \gg k_{i3}$, $k_{i3} = q_h (q_h a_0)^{1/2} \ll q_h \mu^{1/2}$.

Таким образом, для тяжелых дырок расщепление, связанное с отсутствием центра инверсии, оказывается достаточно слабым, превалирует только в области малых импульсов и несущественно в той области импульсов $\mu^{1/3} q_h < k < q_h$, где расщепление (17) становится порядка расстояния между подзонами тяжелых дырок. С другой стороны, при $k \gg q_h$ рассмотренное выше расщепление уменьшается, тогда как объемное $\delta\varepsilon_{3v}$ продолжает монотонно расти.

Для подзон легких дырок асимметрия ямы приводит и к линейному расщеплению (13), которое превалирует над расщеплением, связанным с объемным спектром $\delta\varepsilon_{1v}$, $\delta\varepsilon^{i}_{3v}$ при малых толщинах аккумуляционного слоя (по оценке, совпадающей с выполненной выше для электронного спектра, при $d \leqslant 100$ Å).

Заключение. Формулы (12), (17) определяют соответственно спиновое расщепление двумерного спектра электронов и тяжелых дырок в треугольной яме при малых k. В области больших k спиновое расщепление $\sim 1/k$ и стремится к нулю. Для электронов это происходит при $k > \sqrt{2m_e\varepsilon_g}/\hbar$, для дырок — при $k > q_h$. Максимальное расщепление электронного спектра оказывается порядка $\varepsilon_d\Delta/(\varepsilon_g+\Delta)\times(\Lambda_v+\Lambda_c)/\Lambda_c$, дырочного — порядка ε_{hn}. Учет гофрировки дырочного спектра не меняет зависимостей расщепления от k при малых и больших k, однако в случае сильной гофрировки спектра дырок асимптотическое поведение спектра в области больших k может модифицироваться для ряда ориентаций аккумуляционного слоя вследствие интерференции дырочных волн с заданными значениями ε и k и разными значениями нормальной компоненты импульса дырок [19].

Расщепление двумерного дырочного спектра, обусловленное изменением спинорной части волновой функции при движении в асимметричной потенциальной яме, должно иметь место и в случае плавного потенциала, имеющего чисто электростатическое происхождение. При малых k такое расщепление должно быть порядка расщепления (17), т. е. $\delta\varepsilon \sim \hbar^2k^3/m_lq_h$, однако при $k > \mu^{1/2}q_h$ оно должно убывать с ростом значительно быстрее, чем (26), вследствие компенсации изменения фаз волновых функций в областях поля разного знака.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Ohkawa F. J., Uemura Y. // J. Phys. Soc. Japan. 1974. V. 37. N 5. P. 1325—1333.
[2] Marques G. E., Sham L. J. // Surf. Sci. 1982. V. 113. N 1. P. 131—135.
[3] Дьяконов М. И., Качоровский В. Ю. // ФТП. 1986. Т. 20. В. 1. С. 178—181.
[4] Бычков Ю. А., Рашба Э. И. // Письма ЖЭТФ. 1984. Т. 39. В. 1. С. 66—68.
[5] Ивченко Е. Л., Лянда-Геллер Ю. Б., Пикус Г. Е. // ЖЭТФ. 1990. Т. 98. В. 3. С. 989—1002.
[6] Пикус Г. Е., Марущак В. А., Титков А. Н. // ФТП. 1988. Т. 22. В. 2. С. 185—200.
[7] Васько Ф. Т. // Письма ЖЭТФ. 1979. Т. 30. В. 9. С. 574—577.
[8] Васько Ф. Т. // ФТП. 1985. Т. 19. В. 11. С. 1958—1963.
[9] Раданцев В. Ф. // ЖЭТФ. Т. 96. В. 5. С. 1793—1800.
[10] Васько Ф. Т., Прима Н. А. // ФТТ. 1979. Т. 21. В. 6. С. 1734—1738.
[11] Därr A., Kotthaus J. P., Ando T. // Proc. 13 Int. Conf. on Phys. of Semicond / Ed. by F. G. Fumi. Rome, 1976.
[12] Ando T. // J. Phys. Soc. Japan. 1985. V. 54. N 4. P. 1528—1536.
[13] Bangert E., Landwehr G. // Surf. Sci. 1976. V 58. N 1. P. 138—140.
[14] Алешкин В. Я., Романов Ю. А. // ФТП. 1986. Т. 20. В. 2. С. 281—286.
[15] Райчев О. // ФТП. 1989. Т. 23. В. 7. С. 1226—1231.
[16] Дьяконов М. И., Перель В. И. // ЖЭТФ. 1987. Т. 92. В. 1. С. 320—327.
[17] Бир Г. Л., Пикус Г. Е. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М., 1972. 584 с.
[18] Герчиков Л. Г., Рожнов Г. В., Субашиев А. В. // ЖЭТФ. 1991. Т. 101. В. 2. С. 212.
[19] Герчиков Л. Г., Субашиев А. В. // ФТП. 1991. Т. 25. В. 2. С. 383—387.

Государственный технический университет
Санкт-Петербург

Получена 22.07.1991
Принята к печати 21.08.1991