ОСОБЕННОСТИ СПЕКТРА ОДНООСНО ДЕФОРМИРОВАННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ С ВЫРОЖДЕННЫМИ ЗОНАМИ В МАГНИТНОМ ПОЛЕ, ПЕРПЕНДИКУЛЯРНОМ ДАВЛЕНИЮ

Румянцев Е. Л., Рут О. Э.

Предложен метод расчета энергетического спектра одноосно деформированных алмазоподобных полупроводников в квантующем магнитном поле, перпендикулярном давлению. Приведены результаты расчета уровней Ландау a_0, b_0, a_1, b_1 для бесщелевого полупроводника $Hg_{1-x}Cd_xTe$.

Одноосная деформация приводит к значительной перестройке спектра как алмазоподобных полупроводников с вырожденной валентной зоной Γ_8, так и бесщелевых полупроводников типа HgTe, для которых валентная зона и зона проводимости вырождены в точке $k=0$ и также принадлежат представлению Γ_8 [1]. Экспериментальные исследования энергетического спектра полупроводников, как правило, проводятся в квантующем магнитном поле, поэтому расчет положений уровней Ландау в одноосно деформированных полупроводниках представляет значительный интерес.

При давлении, направленном параллельно магнитному полю, удается точно решить задачу, поскольку в данном случае приложение давления не приводит к дальнейшему понижению симметрии и собственные волновые функции совпадают по виду с собственными функциями, описывающими движение носителя в магнитном поле [2]. Такие расчеты энергетического спектра в зависимости от приложенного давления и магнитного поля приведены, например, для InSb [3] и HgTe [4].

При приложении давления поперек магнитного поля симметрия задачи существенно понижается. Давление в этом случае приводит к перемешиванию уровней Ландау, существовавших в отсутствие давления. Нам не известны работы, в которых было бы проведено исследование спектра в этой ситуации. Используя результаты [1], можно выписать общее выражение для гамильтониана, описывающего поведение уровней энергии четырехкратно вырожденной зоны Γ_8 при наложении аксиального давления χ в произвольном направлении и магнитного поля $\mathbf{H} \perp \boldsymbol{\chi}$:

$$\hat{H}=\hat{H}_L\left(p-\frac{e}{c}A\right)+\hat{H}(\varepsilon),$$

где $\hat{H}_L(\mathbf{p}-\frac{e}{c}\mathbf{A})$ — гамильтониан Латтинжера в магнитном поле, в котором мы пренебрегаем гофрированностью энергетических поверхностей ($\gamma_2=\gamma_3=\bar{\gamma}$); $\hat{H}(\varepsilon)$, согласно [1], имеет следующий вид в системе координат, связанной с главными осями кристалла:

$$\hat{H}(\varepsilon)=\left(a+\frac{5}{4}b\right)\varepsilon-b\sum_i J_i^2\varepsilon_{ii}-\frac{1}{\sqrt{3}}d\sum_{ij}[J_iJ_j]\,\varepsilon_{ij},$$

$$\varepsilon=\mathrm{Sp}\,\varepsilon_{ij},\quad \varepsilon_{ij}=S_{ijmn}n_mn_n\chi,$$

$$[J_iJ_j]={}^1/_2\,(J_iJ_j+J_jJ_i),$$

ε_{ij} — тензор деформации, S_{ijmn} — тензор коэффициентов упругой податливости, n_i — проекции единичного вектора $\mathbf{n}$, описывающего ориентацию давления χ относительно кристаллографических осей, J_i — числовые матрицы 4×4 проекций момента импульса, соответствующие значению $J={}^3/_2$. В отсутствие магнитного поля, как известно [1], изотропная деформация вызывает смещение зон как целого, равное

$$\Delta E = a\varepsilon,$$

а анизотропная деформация расщепляет зоны в точке $\mathbf{k}=0$ на величину $2\mathscr{E}_\varepsilon^{1/2}$:

$$\mathscr{E}_\varepsilon = \frac{b^2}{2}\left[(\varepsilon_{xx}-\varepsilon_{yy})^2+(\varepsilon_{yy}-\varepsilon_{zz})^2+(\varepsilon_{zz}-\varepsilon_{xx})^2\right]+d\,(\varepsilon_{xy}^2+\varepsilon_{yz}^2+\varepsilon_{xz}^2).$$

Совершим преобразование системы координат, с тем чтобы в новой системе координат ось $0z$ была ориентирована вдоль внешнего магнитного поля, а ось $0x$ — вдоль аксиального давления. При этом, ввиду того что в пренебрежении гофрировкой гамильтониан Латтинжера является сферически симметричным, выражение для $\hat{H}_L$ остается прежним, а $\hat{H}(\varepsilon)$ в случае, когда аксиальное давление приложено вдоль [100], [010] или [001], приобретает вид

$$\hat{H}(\varepsilon) = a\varepsilon - 5P + 4PJ_x^2,$$

где введенный нами параметр P следующим образом связан с параметром b и величиной приложенного давления χ через величину $\mathscr{E}_\varepsilon^{1/2}$ [1], описывающую расщепление зон:

$$2\mathscr{E}_\varepsilon^{1/2} = -8P.$$

Ограничиваясь в дальнейшем случаем $k_z=0$ (т. е. вычислением энергий на дне подзон Ландау), а также опуская член $a\varepsilon-5P$, описывающий сдвиг уровней как целого, получаем квазидиагональное выражение для гамильтониана (серии a и b)

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \hat{H}_a & 0 \\ 0 & \hat{H}_b \end{pmatrix},$$

где

$$\hat{H}_a = \begin{pmatrix} -s\left[(\gamma_1+\bar{\gamma})\left(\hat{n}+\frac{1}{2}\right)+\frac{3}{2}k\right]+3P & s\sqrt{3}\,\bar{\gamma}a^2-2\sqrt{3}\,P \\ s\sqrt{3}\,\bar{\gamma}a^{+2}-2\sqrt{3}\,P & -s\left[(\gamma_1-\bar{\gamma})\left(\hat{n}+\frac{1}{2}\right)-\frac{1}{2}k\right]+7P \end{pmatrix},$$
$$\hat{H}_b = \begin{pmatrix} -s\left[(\gamma_1-\bar{\gamma})\left(\hat{n}+\frac{1}{2}\right)+\frac{1}{2}k\right]+7P & s\sqrt{3}\,\bar{\gamma}a^2-2\sqrt{3}\,P \\ s\sqrt{3}\,\bar{\gamma}a^{+2}-2\sqrt{3}\,P & -s\left[(\gamma_1+\bar{\gamma})\left(\hat{n}+\frac{1}{2}\right)-\frac{3}{2}k\right]+3P \end{pmatrix}, \quad (1)$$

γ_1, $\bar{\gamma}$, k — параметры Латтинжера; $s=\hbar eH/m_0c$ — циклотронная энергия свободного электрона; a^+ и a — операторы рождения и уничтожения, описывающие движение носителя в магнитном поле: $a^+=\frac{L}{\sqrt{2}}(k_x+ik_y)$, $a=\frac{L}{\sqrt{2}}(k_x-ik_y)$; $L=(c\hbar/eH)^{1/2}$ — магнитная длина.

В отличие от (1) при $\chi \parallel \mathbf{H} \parallel 0z$ член, описывающий влияние давления, входит только в диагональные матричные элементы [1] (при $k_z=0$ гамильтониан имеет по-прежнему квазидиагональный вид). Используя разложение волновой функции по собственным функциям $|n\rangle$ оператора $\hat{n}=a^+a$ для серии a

$$\psi^a = \begin{pmatrix} \sum_{n=0}^{\infty} a_n^1|n\rangle \\ \sum_{n=0}^{\infty} a_n^2|n\rangle \end{pmatrix}, \quad (2а)$$

для серии b

$$\psi^b = \begin{pmatrix} \sum_{n=0}^{\infty} b_n^1|n\rangle \\ \sum_{n=0}^{\infty} b_n^2|n\rangle \end{pmatrix}, \quad (2б)$$

легко показать, что при $\chi \parallel \mathbf{H}$ собственные функции имеют вид

$$\psi_n^a = \begin{pmatrix} a^1 \mid n\rangle \\ a^2 \mid n+2\rangle \end{pmatrix}, \quad \psi_n^b = \begin{pmatrix} b^1 \mid n\rangle \\ b^2 \mid n+2\rangle \end{pmatrix},$$

т. е. совпадают по виду с собственными функциями, диагонализирующими гамильтониан Латтинжера в магнитном поле при $\chi=0$ [2]. Уровни энергии в данном случае находятся из решения соответствующих секулярных уравнений не выше 2-го порядка. Подстановка в (1) разложения (2а), (2б) в случае $\chi \perp \mathbf{H}$ приводит к бесконечной зацепляющейся системе уравнений, что не позволяет получить решения в аналитическом виде в данном представлении. Нам удалось построить регулярную процедуру получения точных решений в случае $\gamma_1=2\bar{\gamma}$. В интересующих нас полупроводниках $[m_e/m_h=(\gamma_1-2\bar{\gamma})/(\gamma_1+2\bar{\gamma}) \ll 1]$ данное ограничение не представляется существенным и отличие γ_1 от $2\bar{\gamma}$ может быть учтено с нужной точностью по теории возмущения.

Точное решение было получено в результате использования канонического преобразования Боголюбова для гамильтонианов, являющихся квадратичными формами по бозе- или ферми-операторам [5]. От операторов a^+ и a можно перейти к операторам b^+ и b, определенным следующим образом: $a=\lambda b+\mu b^+$, $a^+=\lambda^* b^+ + \mu^* b$.

Требуя, чтобы новые операторы подчинялись бозевским перестановочным соотношениям, получим условие на λ и μ:

$$|\lambda|^2 - |\mu|^2 = 1. \tag{3}$$

Для перехода к новому представлению необходимо совершить в гамильтониане $\hat{H}$ (1) следующую подстановку (как показывает анализ получаемых уравнений, можно ограничиться выбором действительных λ и μ, что и подразумевается в дальнейшем):

$$\hat{n} = a^+ a = \mu\lambda\,(b^2 + b^{+2}) + (\lambda^2 + \mu^2)\, b^+ b + \mu^2,$$
$$a^{+2} = \lambda^2 b^{+2} + \mu^2 b^2 + 2\mu\lambda b^+ b + \mu\lambda,$$
$$a^2 = \lambda^2 b^2 + \mu^2 b^{+2} + 2\mu\lambda b^+ b + \mu\lambda.$$

Поскольку при $k_z=0$ преобразованный гамильтониан по-прежнему имеет квазидиагональный вид, собственные функции являются двукомпонентными. Используя тот факт, что оператор $(-1)^{b^+b}$ коммутирует с гамильтонианом, можно проклассифицировать волновые функции по «четности», т. е. искать решение в виде разложения по «четным»

$$\psi^{(a,\,b)} = \begin{pmatrix} \sum\limits_{n=0}^{\infty} c_{2n}^{1\,(a,\,b)} \mid 2n\rangle \\ \sum\limits_{n=0} c_{2n}^{2\,(a,\,b)} \mid 2n\rangle \end{pmatrix} \tag{4а}$$

или «нечетным»

$$\psi^{(a,\,b)} = \begin{pmatrix} \sum\limits_{n=0} c_{2n+1}^{1\,(a,\,b)} \mid 2n+1\rangle \\ \sum\limits_{n=0} c_{2n+1}^{2\,(a,\,b)} \mid 2n+1\rangle \end{pmatrix} \tag{4б}$$

собственным функциям $|n\rangle$ оператора b^+b. Индексы a и b нумеруют собственные функции операторов $\hat{H}_a$ и $\hat{H}_b$ соответственно. Подставляя волновую функцию (4) в уравнение $\hat{H}_{a,b}\psi^{(a,b)} = \varepsilon_{a,b}\psi^{a,b}$ и приравнивая коэффициенты при одинаковых функциях $|n\rangle$, получаем следующую бесконечную систему уравнений для определения коэффициентов $c_m^{i(a,b)}$ и собственных значений $\varepsilon_{a,b}$: для серии a

$$\left\{-s\left[(\gamma_1+\bar{\gamma})\left(\mu^2 + \frac{1}{2}\right) + (\lambda^2+\mu^2)(\gamma_1+\bar{\gamma})\, m + \frac{3}{2}k\right] + 3P\right\} \times$$
$$\times\, c_m^{1a} - s\,(\gamma_1+\bar{\gamma})\,\mu\lambda\sqrt{m\,(m-1)}\; c_{m-2}^{1a} - s\,(\gamma_1+\bar{\gamma})\,\mu\lambda\sqrt{(m+2)\,(m+1)}\; c_{m+2}^{1a} +$$
$$+ \sqrt{3}\,[-2P + s\bar{\gamma}\mu\lambda\,(2m+1)]\, c_m^{2a} + s\bar{\gamma}\mu^2\sqrt{3m\,(m-1)}\; c_{m-2}^{2a} +$$

$$+s\bar{\gamma}\lambda^2\sqrt{3(m+1)(m+2)}\,c_{m+2}^{2a}=\varepsilon_a c_m^{1a},$$

$$\left\{-s\left[(\gamma_1-\bar{\gamma})\left(\mu^2+\frac{1}{2}\right)+(\lambda^2+\mu^2)(\gamma_1-\bar{\gamma})\,m-\frac{1}{2}k\right]+7P\right\}c_m^{2a}-$$
$$-s(\gamma_1-\bar{\gamma})\mu\lambda\sqrt{m(m-1)}\,c_{m-2}^{2a}-s(\gamma_1-\bar{\gamma})\mu\lambda\sqrt{(m+2)(m+1)}\,c_{m+2}^{2a}+$$
$$+\sqrt{3}\,[-2P+s\bar{\gamma}\mu\lambda(2m+1)]\,c_m^{1a}+s\bar{\gamma}\lambda^2\sqrt{3m(m-1)}\,c_{m-2}^{1a}+$$
$$+s\bar{\gamma}\mu^2\sqrt{3(m+1)(m+2)}\,c_{m+2}^{1a}=\varepsilon_a c_m^{2a}, \tag{5}$$

для серии b

$$\left\{-s\left[(\gamma_1-\gamma)\left(\mu^2+\frac{1}{2}\right)+(\lambda^2+\mu^2)(\gamma_1-\bar{\gamma})\,m+\frac{1}{2}k\right]+7P\right\}c_m^{1b}-$$
$$-s(\gamma_1-\bar{\gamma})\mu\lambda\sqrt{m(m-1)}\,c_{m-2}^{1b}-s(\gamma_1-\bar{\gamma})\mu\lambda\sqrt{(m+2)(m+1)}\,c_{m+2}^{1b}+$$
$$+\sqrt{3}\,[-2P+s\bar{\gamma}\mu\lambda(2m+1)]\,c_m^{2b}+s\bar{\gamma}\mu^2\sqrt{3m(m-1)}\,c_{m-2}^{2b}+$$
$$+s\bar{\gamma}\lambda^2\sqrt{3(m+1)(m+2)}\,c_{m+2}^{2b}=\varepsilon_b c_m^{1b},$$

$$\left\{-s\left[(\gamma_1+\bar{\gamma})\left(\mu^2+\frac{1}{2}\right)+(\lambda^2+\mu^2)(\gamma_1+\bar{\gamma})\,m-\frac{3}{2}k\right]+3P\right\}c_m^{2b}-$$
$$-s(\gamma_1+\bar{\gamma})\mu\lambda\sqrt{m(m-1)}\,c_{m-2}^{2b}-s(\gamma_1+\bar{\gamma})\mu\lambda\sqrt{(m+2)(m+1)}\,c_{m+2}^{2b}+$$
$$+\sqrt{3}\,[-2P+s\bar{\gamma}\mu\lambda(2m+1)]\,c_m^{1b}+s\bar{\gamma}\lambda^2\sqrt{3m(m-1)}\,c_{m-2}^{1b}+$$
$$+s\bar{\gamma}\mu^2\sqrt{3(m+1)(m+2)}\,c_{m+2}^{1b}=\varepsilon_b c_m^{2b}, \tag{6}$$

где $m=2n,\ 2n+1$ $(n=0,\ 1,\ 2,\ \ldots)$ в зависимости от «четности» решения.

Как и в непреобразованном гамильтониане, наибольшую «опасность» представляют члены с b^{+2}, которые, примешивая к функциям $|m\rangle$ функции $|m+2\rangle$, приводят к бесконечному ряду в выражении для волновой функции (4) и соответственно к бесконечной системе уравнений для определения $\varepsilon_{a,b}$ (5), (6). Можно попытаться оборвать этот ряд при некотором N и тем самым получить конечную алгебраическую систему на определение коэффициентов $c_m^{i(a,b)}$ и энергии, использовав свободу в выборе λ и μ. В этом случае из (5) и (6) получаем конечную систему уравнений, из которых два последних имеют вид (одинаковый для любого n и любой четности): для серии a

$$-s(\gamma_1+\bar{\gamma})\mu\lambda c_N^{1a}+s\bar{\gamma}\mu^2\sqrt{3}\,c_N^{2a}=0,$$
$$-s(\gamma_1-\bar{\gamma})\mu\lambda c_N^{2a}+s\bar{\gamma}\lambda^2\sqrt{3}\,c_N^{1a}=0, \tag{7}$$

для серии b

$$-s(\gamma_1-\bar{\gamma})\mu\lambda c_N^{1b}+s\bar{\gamma}\mu^2\sqrt{3}\,c_N^{2b}=0,$$
$$-s(\gamma_1+\bar{\gamma})\mu\lambda c_N^{2b}+s\bar{\gamma}\lambda^2\sqrt{3}\,c_N^{1b}=0. \tag{8}$$

В обычном случае квадратичных гамильтонианов [5] уравнение на определение λ и μ получается из условия обращения в нуль коэффициентов при членах, содержащих b^{+2}. Однако ввиду матричной структуры гамильтониана в нашем случае возникают два уравнения на определение λ и μ, уже связанных условием (3). При произвольном соотношении между γ_1 и $\bar{\gamma}$ ясно, что как система уравнений (7) для серии a, так и система уравнений (8) для серии b несовместимы. В случае $\gamma_1=2\bar{\gamma}$ уравнения (7) и соответственно уравнения (8) тождественны. Таким образом, при данном ограничении возникают следующие условия, определяющие λ и μ: для серии a

$$\sqrt{3}\,c_N^{1a}\lambda=\mu c_N^{2a}, \tag{9}$$

для серии b

$$c_N^{1b}\lambda=\sqrt{3}\,\mu c_N^{2b}. \tag{10}$$

Данные условия неявно зависят от P через зависимость от давления параметров λ и μ.

Выпишем для иллюстрации полную систему уравнений, определяющих уровни энергии для функций вида

$$\psi^{(a,\,b)} = \begin{pmatrix} c_0^{1\,(a,\,b)}\,|\,0\rangle \\ c_0^{2\,(a,\,b)}\,|\,0\rangle \end{pmatrix}.$$

Для серии a, согласно (5), (9),

$$\begin{gathered} \sqrt{3}\, c_0^{1a}\lambda = c_0^{2a}\mu, \\ c_0^{1a}\left\{-s\left[3\bar{\gamma}\mu^2 + \frac{3}{2}(\bar{\gamma}+k)\right] + 3P\right\} + c_0^{2a}\left\{s\sqrt{3}\,\bar{\gamma}\mu\lambda - 2\sqrt{3}\,P\right\} = \varepsilon_{a_0} c_0^{1a}, \\ c_0^{1a}\left\{s\sqrt{3}\,\bar{\gamma}\mu\lambda - 2\sqrt{3}\,P\right\} + c_0^{2a}\left\{-s\left[\bar{\gamma}\mu^2 + \frac{1}{2}(\bar{\gamma}-k)\right] + 7P\right\} = \varepsilon_{a_0} c_0^{2a}. \end{gathered} \tag{11}$$

Для серии b, согласно (6), (10),

$$\begin{gathered} \lambda c_0^{1b} = \sqrt{3}\, c_0^{2b}\mu, \\ c_0^{1b}\left\{-s\left[\bar{\gamma}\mu^2 + \frac{1}{2}(\bar{\gamma}+k)\right] + 7P\right\} + c_0^{2b}\left\{s\sqrt{3}\,\bar{\gamma}\mu\lambda - 2\sqrt{3}\,P\right\} = \varepsilon_{b_0} c_0^{1b}, \\ c_0^{1b}\left\{s\sqrt{3}\,\bar{\gamma}\mu\lambda - 2\sqrt{3}\,P\right\} + c_0^{2b}\left\{-s\left[3\bar{\gamma}\mu^2 + \frac{3}{2}(\bar{\gamma}-k)\right] + 3P\right\} = \varepsilon_{b_0} c_0^{2b}. \end{gathered} \tag{12}$$

При $P=0$ решениями данных уравнений являются: для серии a

$$\mu = 0,\ \ \lambda = 1,\ \ \varepsilon_{a_0} = -\frac{1}{2}s(\bar{\gamma}-k),\ \ \psi^a = \begin{pmatrix} 0 \\ |\,0\rangle \end{pmatrix},$$

для серии b

$$\mu = 0,\ \ \lambda = 1,\ \ \varepsilon_{b_0} = -\frac{3}{2}s(\bar{\gamma}-k),\ \ \psi^b = \begin{pmatrix} 0 \\ |\,0\rangle \end{pmatrix},$$

т. е. результат, полученный в [2] для случая $\chi=0$. Решения систем (11), (12), т. е. зависимости ε_{a_0}, ε_{b_0} от H и P, в общем случае имеют вид

$$\varepsilon_{a_0} = -\frac{1}{2}s(-\bar{\gamma}+k) + 5P + 2P\left\{\left[\frac{-\frac{1}{2}s(\bar{\gamma}-k)+P}{P}\right]^2 + 3\right\}^{1/2},$$

$$\varepsilon_{b_0} = \frac{1}{2}s(\bar{\gamma}-k) + 5P - 2P\left\{\left[\frac{\frac{1}{2}s(\bar{\gamma}-k)-P}{P}\right]^2 + 3\right\}^{1/2}.$$

Легко получить также решения ε_{a_1}, ε_{b_1} для функций

$$\psi^{(a,\,b)} = \begin{pmatrix} c_1^{1\,(a,\,b)}\,|\,1\rangle \\ c_1^{2\,(a,\,b)}\,|\,1\rangle \end{pmatrix},$$

которые имеют вид

$$\varepsilon_{a_1} = -\frac{1}{2}s(-3\bar{\gamma}+k) + 5P - 2P\left\{\left[\frac{-\frac{1}{2}s(3\bar{\gamma}-k)+P}{P}\right]^2 + 3\right\}^{1/2},$$

$$\varepsilon_{b_1} = -\frac{1}{2}s(3\bar{\gamma}-k) + 5P - 2P\left\{\left[\frac{-\frac{1}{2}s(3\bar{\gamma}-k)-P}{P}\right]^2 + 3\right\}^{1/2}.$$

Графики полученных зависимостей ε_{a_0}, ε_{b_0}, ε_{a_1}, ε_{b_1} от магнитного поля при $P=2$ мэВ для бесщелевого полупроводника типа HgCdTe с параметрами $\varepsilon_g = -100$ мэВ, $E_p = 17$ эВ приведены на рис. 1.

Обратим внимание на «обрыв» точного решения $\varepsilon_{a_1}(H)$ в точке $H=12$ кЭ. При $H < 12$ кЭ в системе уравнений для $\varepsilon_{a_1}(H)$ не удовлетворяется условие (3), которое приводит к неравенству $|\,\mu/\lambda\,| = y \leqslant 1$. На рис. 2 приведена зависимость $y(H)$, из которой легко определить точку «обрыва» для корня ε_{a_1}. Чтобы найти энергию уровня a_1 в области $H < 12$ кЭ, а также энергии следующих уровней, необходимо учесть перемешивание осцилляторных функций с разными номерами, т. е. рассмотреть системы уравнений, возникающих для функций вида

$$\psi^{(a,\,b)} = \begin{pmatrix} c_0^{1\,(a,\,b)}\,|\,0\rangle + c_2^{1\,(a,\,b)}\,|\,2\rangle \\ c_0^{2\,(a,\,b)}\,|\,0\rangle + c_2^{2\,(a,\,b)}\,|\,2\rangle \end{pmatrix},$$

и т. д.

В данной работе мы ограничились вычислением уровней $a_{0,\ 1}$, $b_{0,\ 1}$, поскольку именно они представляют наибольший интерес с точки зрения эксперимента. Действительно, в бесщелевом полупроводнике наложение аксиального давления приводит к возникновению запрещенной зоны, которая в магнитном поле определяется расстоянием между уровнями a_1, b_0 в случае $\chi \perp \mathbf{H}$ (рис. 1). То, что уровни a_1 и b_0 являются верхним и нижним уровнями Ландау валентной зоны и зоны проводимости, следует из рис. 3, где приведена зависимость энергий этих уровней от квазиимпульса вдоль направления магнитного поля $\varepsilon(k_z)$. Представленные на этом рисунке законы дисперсии являются результатами приближенного счета, поскольку даже в случае $\gamma_1=2\bar{\gamma}$ не удается построить точного решения для $k_z \neq 0$. Эти корни были получены при использовании разложения по собственным функциям задачи с $\chi=0$. При этом, как уже отмечалось, возникает детерминант бесконечного порядка. В численном счете мы

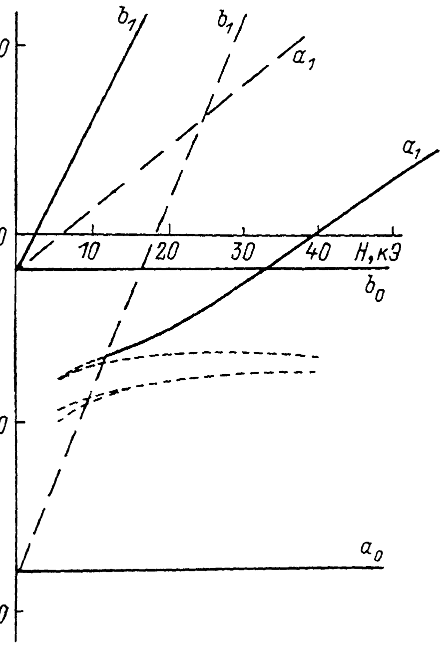

Рис. 1. Зависимость положения уровней Ландау от магнитного поля, рассчитанная с параметрами, указанными в тексте.

Сплошные линии — $\mathbf{H} \perp \chi$, точное решение и результат приближенного расчета, пунктирные — результат приближенного расчета в области, где не было получено точного решения, штриховые — $\mathbf{H} \parallel \chi$.

ограничились определителем 44-го порядка, т. е. учитывали перепутывание давлением уровней Ландау с $n=0 \div 10$. Таким же образом были рассчитаны зависимости $\varepsilon(H)$ и при $k_z=0$. В результате такого расчета были получены корни, которые, как видно из рис. 1, совпадают с точным решением для уровней $a_{0,\ 1}$, $b_{0,\ 1}$. Это позволяет утверждать, что расчеты, сделанные приближенным способом, являются достоверными и могут быть использованы для анализа интересующих нас состояний, т. е. состояний, определяющих потолок валентной зоны и дно зоны проводимости.

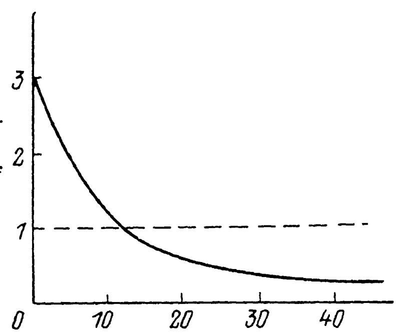

Рис. 2. Зависимость параметра μ/λ от магнитного поля.

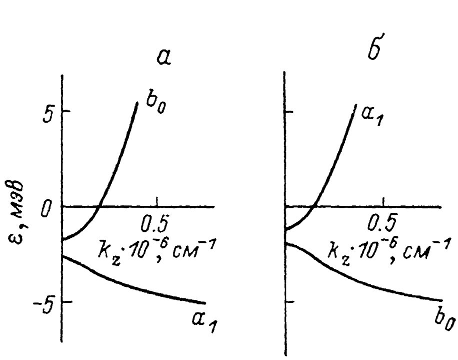

Рис. 3. Зависимость $\varepsilon(k_z)$ для уровней a_1 и b_0. $\mathbf{H} \perp \chi$. H, кЭ: *а* — 30, *б* — 35.

Для сравнения на рис. 1 приведены положения актуальных уровней Ландау при $\chi \parallel \mathbf{H}$, полученные согласно [4]. Видно, что в этом случае приложенное давление также приводит к возникновению запрещенной зоны Δ, которая с увеличением магнитного поля уменьшается до нуля, а затем появляется снова и начинает возрастать. Скорость изменения Δ и величина магнитного поля, при котором $\Delta = 0$, существенно зависят от взаимной ориентации $\varkappa$ и H. Такое различие в поведении уровней должно учитываться при интерпретации экспериментальных результатов исследований одноосно деформированных бесщелевых полупроводников.

Предложенный метод точного расчета энергетических уровней может быть использован и в случае полупроводников с вырожденной валентной зоной Γ_8. И в этом случае, как показывают расчеты, квантование спектра происходит существенно различным образом в зависимости от относительной ориентации давления и магнитного поля.

Литература

[1] Бир Г. Л., Пикус Г. Е. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М., 1972. 584 с.

[2] Guldner Y., Rigaux C., Grynberg M., Mycielski A. — Phys. Rev. B, 1973, v. 8, N 8, p. 3875—3883.

[3] Trebin H. R., Rossler V., Ranvaud R. — Phys. Rev. B, 1972, v. 20, N 2, p. 686—700.

[4] Takita K., Onabe K., Tanaka S. — Phys. St. Sol. (b), 1979, v. 92, N 1, p. 297—306.

[5] Тябликов С. В. Методы квантовой теории магнетизма. М., 1975. 528 с.

Уральский государственный
университет им. А. М. Горького
Свердловск

Получена 15.07.1987
Принята к печати 4.01.1988