Влияние деформации на спиновое расщепление в квазидвумерных дырочных системах

© *В.Е. Бисти*

Институт физики твердого тела Российской академии наук,
142432 Черноголовка, Московская обл., Россия

(Поступила в Редакцию 12 мая 1997 г.
В окончательной редакции 22 сентября 1997 г.)

Получен эффективный гамильтониан дырок в двумерном канале при одноосной деформации вдоль слоя. Рассмотрены двумерные каналы на поверхности Si в приближении сферически-симметричной валентной зоны и на поверхностях (100) и (110) при учете кубической симметрии. Показано, что линейный по деформации сдвиг положения биения осцилляций Шубникова–де Гааза обусловлен неэквивалентностью оси сжатия–растяжения и перпендикулярного ей направления в плоскости на поверхности (110).

Как известно, отсутствие в системах центра инверсии при учете спин-орбитального взаимодействия должно приводить к снятию спинового вырождения в электронном спектре при $\mathbf{k} \neq 0$ [1,2]. Примерами таких систем являются квазидвумерные каналы в кремниевых МДП-структурах, гетеропереходах и асимметричных квантовых ямах на основе GaAs. Для изучения спинового расщепления уровней используется наблюдение осцилляций Шубникова–де Гааза (ШдГ). Спиновое расщепление приводит к сбою фазы (биениям) в этих осцилляциях, что было показано экспериментально [3–5] и теоретически [6] как для электронов в GaAs-гетеропереходах, так и для дырок в Si МДП-структурах. В работе [6] был получен эффективный двумерный гамильтониан дырок в асимметричной квантовой яме и найдено спиновое расщепление, пропорциональное k^3. Поведение осцилляций ШдГ при одноосном растяжении или сжатии вдоль оси [001] в плоскости двумерных дырочных каналов (поверхность (110)) в кремниевых полевых транзисторах изучалось экспериментально [7]; был обнаружен зависящий от знака деформации сдвиг положения биения. Предпринималась также попытка численного анализа этих экспериментов [8].

В данной работе аналитически рассмотрено влияние деформации в плоскости дырочного канала на осцилляции ШдГ. Получен вид эффективного гамильтониана дырок в двумерном канале (асимметричной квантовой яме) при условии, что деформация в плоскости может рассматриваться как возмущение. Рассмотрены следующие случаи: a) деформация в плоскости двумерного канала в приближении сферически-симметричной валентной зоны (т. е. без учета гофрировки); b) плоскость двумерного канала (100), деформация вдоль оси [001]; c) плоскость двумерного канала (110), деформация вдоль оси [001]. Обозначения a–c для перечисленных случаев сохранятся на протяжении всей статьи.

Показано, что в гамильтониане помимо кубического появляется линейный по k член, пропорциональный деформации. Установлено, что линейно зависящая от деформации поправка к уровням Ландау и, следовательно, сдвиг положения биений в осцилляциях ШдГ возникают только при учете гофрировки и только при понижении симметрии поверхности (необходима неэквивалентность оси сжатия–растяжения и перпендикулярного ей направления в плоскости, как, например, для поверхности (110)).

1. Эффективный гамильтониан и спиновое расщепление дырок в двумерном канале при одноосной деформации вдоль слоя

Рассмотрим систему частиц с вырожденной энергетической зоной (дырок), описываемой гамильтонианом Латтинжера [9,10]. Дырки находятся в асимметричной квантовой яме $V(z)$ вблизи поверхности (ось z направлена по нормали к поверхности). Кроме того, система может помещаться в магнитное поле $\mathbf{H}$, направленное по оси z, и подвергаться одноосному сжатию или растяжению по оси x вдоль поверхности.

Гамильтониан рассматриваемой системы $H(\hat{\mathbf{k}}, \mathbf{H}, \varepsilon)$ в базисе $|j_z\rangle$ имеет вид

$$H(\hat{\mathbf{k}}, \mathbf{H}, \varepsilon) = H_0(\hat{\mathbf{k}}) + \mu_0 g_0 \varkappa \mathbf{HJ} + H(\varepsilon) + V(z), \qquad (1)$$

где $\mathbf{J}$ — матрицы спина 3/2, $\hat{\mathbf{k}} = \mathbf{k} + e\mathbf{A}/\hbar c$ ($\mathbf{A}$ — вектор-потенциал), $H_0(\mathbf{k})$ — гамильтониан Латтинжера,

$$H_0(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m_0} \begin{vmatrix} P+Q & -S & R & 0 \\ -S^* & P-Q & 0 & R \\ R^* & 0 & P-Q & S \\ 0 & R^* & S^* & P+Q \end{vmatrix}. \qquad (2)$$

a) В сферическом приближении для валентной зоны ($\gamma_2 = \gamma_3$) элементы матрицы гамильтониана $H_0(\mathbf{k})$ имеют вид

$$P = \gamma_1 \left(k_z^2 + k^2\right), \quad Q = \gamma_2(-2k_z^2 + k^2), \quad S = 2\sqrt{3}\gamma_2 k_z k_-,$$

$$R = -\sqrt{3}\gamma_2 k_-^2, \quad k_\pm = k_x \pm i k_y, \quad k^2 = k_x^2 + k_y^2. \qquad (3)$$

b) Если ось z направлена по [100], а ось x — по оси [001], то P и Q те же, что и в сферическом приближении (3),

$$S = 2\sqrt{3}\gamma_3 k_z k_-,$$

$$R = -\frac{\sqrt{3}}{2}\left[(\gamma_2+\gamma_3)k^2 + (\gamma_2-\gamma_3)k_+^2\right]$$

$$= -\sqrt{3}\gamma_2\left(k_-^2 + \delta k_+^2\right), \quad (4)$$

где $\tilde{\gamma}_2 = (\gamma_2+\gamma_3)/2$, $\delta = (\gamma_2-\gamma_3)/(\gamma_2+\gamma_3)$.

c) В случае, если ось $z \parallel [110]$, ось $x \parallel [001]$, согласно [11], имеем

$$P = \gamma_1\left(k_z^2 + k^2\right),$$

$$Q = -\frac{3\gamma_3+\gamma_2}{2}2k_z^2 + \gamma_2 k_x^2 + \frac{3\gamma_3-\gamma_2}{2}k_y^2,$$

$$R = -\sqrt{3}\left(\frac{\gamma_3-\gamma_2}{2}k_z^2 + \gamma_2 k_x^2 - \frac{\gamma_3+\gamma_2}{2}k_y^2 + 2i\gamma_3 k_x k_y\right),$$

$$S = 2\sqrt{3}k_z(\gamma_3 k_x - i\gamma_2 k_y), \quad (5)$$

γ_1, γ_2, γ_3, κ — параметры Латтинжера.

Слагаемое $H(\varepsilon)$ описывает влияние деформации. Если оси x, y, z совпадают с кристаллографическими осями, то

$$H(\varepsilon) = \begin{vmatrix} p+q & h & j & 0 \\ h^* & p-q & 0 & j \\ j^* & 0 & p-q & -h \\ 0 & j^* & -h^* & p+q \end{vmatrix}, \quad (6)$$

$$p = a(\varepsilon_{xx}+\varepsilon_{yy}+\varepsilon_{zz}), \quad q = \frac{b}{2}(\varepsilon_{xx}+\varepsilon_{yy}-2\varepsilon_{zz}),$$

$$h = -(i\varepsilon_{xz}+\varepsilon_{yz}), \quad j = -\frac{\sqrt{3}}{2}b(\varepsilon_{xx}-\varepsilon_{yy}) - id\varepsilon_{xy}, \quad (7)$$

a, b, d — константы деформационного потенциала [12]. Сферическому приближению соответствует $d = \sqrt{3}b$; при этом вид $H(\varepsilon)$ не зависит от ориентации осей. Далее $H(\varepsilon)$ будет рассматриваться только в сферическом приближении.

Зависимость деформации от приложенного напряжения учитываем точно. Растяжение и сжатие происходит вдоль кристаллографической оси [001] (ось x). Как для оси $z \parallel [110]$, так и для оси $z \parallel [100]$ тензор деформации имеет три неисчезающие компоненты ε_{xx}, ε_{yy}, ε_{zz},

$$\varepsilon_{yy} = \varepsilon_{zz} = -t\varepsilon_{xx}, \quad t = \frac{C'_{12}}{C'_{11}+C'_{12}}, \quad (8)$$

где C'_{ij} — упругие константы (для Si C'_{11}169 GPa, $C'_{12} = 65$ GPa [8]). Тогда $h = 0$, $j = -\frac{\sqrt{3}}{2}b\varepsilon_{xx}(1+t)$.

Эффективный гамильтониан квазидвумерных дырок для поверхности (001) в магнитном поле, но без деформации был получен по теории возмущений в [6]. В качестве нулевого приближения использовался гамильтониан $H_0(k_z) + V(z)$, дающий набор двукратно вырожденных уровней E_m и E_n для легких и тяжелых дырок соответственно. Квазидвумерное движение вблизи каждого из этих уровней при этом описывается эффективным $2D$-гамильтонианом $H_{n(m)}\left(\hat{k}_x, \hat{k}_y, \mathbf{H}\right)$. Действуя аналогично, получаем по теории возмущений гамильтониан для основного состояния тяжелых дырок при деформации

$$H_{0h} = E_{0h}(\varepsilon) + \frac{\hbar^2}{2m_{0h}}\hat{k}^2 + \frac{3}{2}g_{0h}H_z\sigma_z$$

$$+ \beta_{0h}\left[\left(\frac{\hbar^2}{2m_0}\hat{R} + j\right)\hat{S}\sigma_+ - \left(\frac{\hbar^2}{2m_0}\hat{R}^* + j\right)\hat{S}^*\sigma_-\right], \quad (9)$$

σ_x, σ_y, σ_z — матрицы Паули, $\sigma_\pm = (\sigma_x \pm i\sigma_y)/2$,

$$E_{0h}(\varepsilon) = E_{0h} + p + q, \quad \frac{1}{m_{0h}} = \frac{1}{m_0}(\gamma_1+\gamma_2+\gamma_{0h}),$$

$$g_{0h} = g_0 k + \frac{2}{3}\gamma_{0h}, \quad \gamma_{0h} = \frac{\hbar^2}{2m_0}\sum_m 3\gamma_3^2\frac{|\langle 0h|k_z|m\rangle|^2}{E_{0h}-E_m},$$

$$\beta_{0h} = \frac{\hbar_2}{2m_0}\sum_m \frac{\langle 0h|m\rangle\langle m|k_z|0h\rangle}{E_{0h}-E_m}. \quad (10)$$

Для треугольной ямы при $V(z) = 2\pi n_s ez/\varepsilon_0$ (n_s — двумерная плотность, ε_0 — диэлектрическая проницаемость) рассчитано, что

$$\gamma_{0h} = -0.575(\gamma_1 - 2\gamma_2),$$

$$\beta' = i\sqrt{3}\gamma_3\beta_{0h} = (\gamma_1-2\gamma_2)^{4/3}(n_0/n_s)^{1/3}\cdot 0.644\cdot 10^{-5}\,(\mathrm{cm})$$

$$(n_0 = 10^{12}\,\mathrm{cm}^{-2}).$$

Рассмотрим конкретный вид уровней энергии в различных случаях.

a) Без учета гофрировки, делая унитарное преобразование $H_{0h} = U^+H_{0h}^2U$, где $U = \frac{1}{2}(1+\sigma_z)$, приводим $2D$-гамильтониан к виду

$$H_{0h} = E_{0h}(\varepsilon) + \frac{\hbar^2}{2m_{0h}}\hat{k}^2 + \frac{3}{2}g_{0h}H_z\sigma_z$$

$$+ \beta' j[\boldsymbol{\sigma}\times\hat{\mathbf{k}}]\mathbf{n} + \beta''[\boldsymbol{\sigma}\times\boldsymbol{\kappa}]\mathbf{n}, \quad (11)$$

где $\boldsymbol{\kappa} = \left\{k_x\left(k_x^2 - 3k_y^2\right), -k_y\left(k_y^2 - 3k_x^2\right), 0\right\}$, $\beta'' = \frac{\hbar^2}{2m_0} \times \sqrt{3}\gamma_2\beta'$. Линейный член здесь такого же вида, как и у Бычкова–Рашбы [1].

В отсутствие магнитного поля гамильтониан (9) дает уровни энергии

$$E_{0h}^2 = \frac{\hbar^2}{2m_{0h}}k^2 \pm k\beta'\sqrt{\beta''^2k^4 + j^2 + 2\beta'' jk^2\cos 2\varphi}. \quad (12)$$

b) Для поверхности (100) уровни энергии имеют вид

$$E_{0h}^2 = \frac{\hbar^2}{2m_{0h}}k^2 \pm k\beta'$$

$$\times\sqrt{\beta''^2k^4\left(1+\delta^2+2\delta\cos 4\varphi\right) + j^2 + 2\beta'' j(1+\delta)k^2\cos 2\varphi}\,. \quad (13)$$

c) Для поверхности (110) гамильтониан $H_0(\mathbf{k})$ (2) приводится вначале к виду, диагональному при $k = 0$, так как члены, зависящие только от k_z, включаются в нулевое приближение и учитываются точно. Диагонализованный гамильтониан $H_0'(\mathbf{k})$ имеет вид, аналогичный (2), с элементами P', Q', S', R'.

$$P' = P, \qquad S' = S,$$

$$Q' = -\sqrt{3\gamma_3^2 + \gamma_2^2}k_z^2 + \left(\frac{\gamma_2(3\gamma_3+\gamma_2)}{2\sqrt{3\gamma_3^2+\gamma_2^2}} - \frac{3\gamma_2(\gamma_3-\gamma_2)}{2\sqrt{3\gamma_3^2-\gamma_2^2}}\right)k_x^2 + \left(\frac{(3\gamma_3-\gamma_2)(3\gamma_3+\gamma_2)}{4\sqrt{3\gamma_3^2+\gamma_2^2}} + \frac{3(\gamma_3+\gamma_2)(\gamma_3-\gamma_2)}{4\sqrt{3\gamma_3^2+\gamma_2^2}}\right)k_y^2,$$

$$R' = -\sqrt{3}\left(\frac{(\gamma_2)(3\gamma_3+\gamma_2)}{2\sqrt{3\gamma_3^2+\gamma_2^2}}k_x^2 - \frac{(\gamma_3+\gamma_2)(3\gamma_3+\gamma_2)}{4\sqrt{3\gamma_3^2+\gamma_2^2}}k_y^2 + 2i\gamma_3 k_x k_y\right). \qquad (14)$$

Затем по схеме [6] определяется эффективный гамильтониан вида (9), дающий следующие уровни энергии для основного состояния тяжелых дырок:

$$E_{0h} = \frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{k_x^2}{m_{0x}} + \frac{k_y^2}{m_{0y}}\right) \pm |\beta_{0h}|\sqrt{|S|^2(R'+j)(R'^*+j)}. \qquad (15)$$

Анизотропию в квадратичном по k члене удобно перевести во второе слагаемое с помощью масштабного преобразования

$$k_x = k_x'\left(\frac{m_{0x}}{m_{0y}}\right)^{1/4}, \qquad k_y = k_y'\left(\frac{m_{0x}}{m_{0y}}\right)^{1/4} \qquad (16)$$

(для расчетов с использованием потенциала (9) $m_{0x}/m_{0y} \approx 2$). После этого анизотропия в членах R' значительно уменьшится, и ее можно в дальнейшем не учитывать. Анизотропия же в членах S, наоборот, возрастет.

$$E_{0h} \approx \frac{\hbar^2 k'^2}{2\sqrt{m_{0x}m_{0y}}} \pm \beta' k' \times\sqrt{\left(\cos^2\varphi + \tilde{\delta}\sin^2\varphi\right)\left(\beta''^2 k'^4 + j^2 + 2\beta'' j k'^2\cos 2\varphi\right)},$$

$$\tilde{\delta} = (\gamma_2/\gamma_3)^2(m_{0y}/m_{0x}) \sim 0.1 \ll 1. \qquad (17)$$

2. Влияние деформации на уровни Ландау

В магнитном поле уровни энергии находятся аналитически для изотропного двумерного гамильтониана в случае или только линейного [1], или только кубического [6] члена, ответственного за спиновое расщепление. Волновые функции имеют при этом вид χ_N (для линейного расщепления) или ϕ_N (для кубического расщепления), где

$$\chi_N = \begin{pmatrix} Au_{N-1} \\ Bu_N \end{pmatrix}, \qquad \phi_N = \begin{pmatrix} Cu_{N-3} \\ Du_N \end{pmatrix} \qquad (18)$$

(u_N — функции гармонического осциллятора).

Считая в полученном гамильтониане (9) член, зависящий от деформации, малым по сравнению с кубическим, проанализируем его влияние на уровни Ландау для трех рассматриваемых случаев.

a) Гамильтониан (11) при $j = 0$ имеет аналитическое решение, и волновые функции имеют вид ϕ_N. Добавление члена $\beta' j[\boldsymbol{\sigma}\times\hat{\mathbf{k}}]\mathbf{n}$ не дает поправки первого порядка к уровням энергии в магнитном поле.

b) Для поверхности (100) учет гофрировки приводит к смешиванию состояний ϕ_N и $\phi_{N\pm4}$, что опять не дает линейных по j поправок к уровням Ландау. Следовательно, в этих двух случаях не будет и сдвига положения биений, зависящего от знака деформации.

c) Анизотропия поверхности (110) "зацепляет" состояния ϕ_N, $\phi_{N\pm2}$, что приводит к членам вида χ_N в волновой функции при $j = 0$. Поэтому возникает линейная по j поправка ΔE_j^N к уровням Ландау

$$\Delta E_j^N \sim \left(1-\tilde{\delta}\right)\beta' j \lambda_H^{-1}(N)^{1/2} \qquad (19)$$

(где $\lambda_H = (\hbar c/eH)^{1/2}$), приводящая к пропорциональному деформации сдвигу положения узла биений в осцилляциях ЩдГ.

3. Обсуждение результатов

Полученные результаты для поверхности (110) качественно согласуются с экспериментальными данными [7] и результатами численных расчетов [8]. Кроме того, проведенное выше рассмотрение позволяет сделать новый вывод о том, что линейно зависящий от деформации сдвиг положения биений существует только при учете гофрировки и только вследствие более низкой симметрии поверхности (110). Этот вывод невозможно сделать из данных численных расчетов. Аналитическое рассмотрение позволяет также объяснить чувствительность результатов численного счета к выбору параметров Латтинжера: эффект линейной зависимости положения биений от деформации существует в меру анизотропии (19). Количественное несоответствие [7] и [8] помимо приводимого авторами [7] различия в параметрах Латтинжера и константах деформационного потенциала можно частично объяснить также влиянием деформации, возникающей вследствие различия коэффициентов теплового расширения Si и SiO_2 [13]., Это всестороннее растяжение в плоскости с характерным значением напряжения 0.1 kbar, эквивалентное сжатию вдоль оси (110), приводит к добавке в гамильтониан $H(\varepsilon)$ (5), где $q = -b\varepsilon_{zz}(1 + 2t) = \Delta \sim 5\,\text{meV}$. Изменяются расстояние между подзонами и как следствие спиновое расщепление, определяемое коэффициентом β'. При учете анизотропии возникает и линейный по k член, однако величина его значительно меньше, чем у возникающего за счет приложенных внешних напряжений, и поэтому он не может играть существенной роли при объяснении экспериментов [7].

Автор выражает благодарность С.И. Дорожкину и В.М. Эдельштейну за полезные дискуссии и постоянное внимание к работе.

Работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 95-02-06107).

Список литературы

[1] Ю.А. Бычков, Э.И. Рашба. Письма в ЖЭТФ **39**, 66 (1984).
[2] Ф.Т. Васько. Письма в ЖЭТФ **30**, 574 (1979).
[3] S.I. Dorozhkin. Phys. Rev. **B41**, 3225 (1990).
[4] С.И. Дорожкин, Е.Б. Ольшанецкий. Письма в ЖЭТФ **48**, 543 (1988).
[5] K. von Klitzing, G. Landwehr, G. Dorda. Solid State Commun. **14**, 387 (1974).
[6] V.E. Bisti. Superlatt. Microstruct. **10**, *4*, 485 (1991).
[7] С.И. Дорожкин, Г. Ландвер. Письма в ЖЭТФ **64**, 630 (1966).
[8] W.O.G. Schmitt. Phys. Rev. **B50**, 15 239 (1994).
[9] J.M. Luttinger, W. Kohn. Phys. Rev. **97**, 869 (1955).
[10] J.M. Luttinger. Phys. Rev. **102**, 1030 (1956).
[11] W.O.G. Schmitt. Phys. Rev. **B50**, 15 221 (1994).
[12] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. Наука, М. (1972).
[13] M.V. Whelan, A.N. Goemans, L.M.C. Goossens. Appl. Phys. Lett. **10**, 262 (1967).