

Влияние спин-орбитального взаимодействия на спектр двумерных электронов в магнитном поле

© П.С. Алексеев^{*,†,¶}, М.В. Якунин^{*}, И.Н. Яссиевич^{*,¶¶}

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

[†] Санкт-Петербургский государственный политехнический университет, 195251 Санкт-Петербург, Россия

[¶] Институт физики металлов Уральского отделения Российской академии наук, 620219 Екатеринбург, Россия

(Получена 12 февраля 2007 г. Принята к печати 15 февраля 2007 г.)

Исследованы электронные состояния в полупроводниках со структурой цинковой обманки во внешнем магнитном поле с учетом собственного спинового расщепления. Гамильтониан спин-орбитального взаимодействия строится методом инвариантов. Рассмотрены эффекты модификации энергетического спектра двумерных электронов в одиночной и двойной квантовых ямах в магнитном поле, параллельном плоскости интерфейсов.

PACS: 61.82.Fk, 68.65.Fg, 61.50.Ah

1. Введение

В последнее время в связи с успехами технологии гетероструктур и перспективами развития спинтроники значительный интерес привлекает к себе проблема изучения электронных спиновых состояний и спинового транспорта в полупроводниковых структурах. Электронные состояния в присутствии магнитного поля в полупроводниковых материалах и структурах, обладающих осью симметрии высокого порядка, теоретически изучались в [1,2]. Примером таких материалов служили объемные полупроводники типа вюрцита и гетероструктуры. Спин-орбитальное взаимодействие учитывалось методом эффективной массы и приводило к линейному по волновому вектору расщеплению электронного спектра.

В [3–5] теоретически исследовалось влияние спин-орбитального взаимодействия в виде слагаемых Рашбы и Дрессельхауза на движение электронов в магнитном поле в одномерных и двумерных полупроводниковых структурах. В [3] исследовался спектр одномерных электронов и было показано, что одновременный учет членов Рашбы и Зеемана в эффективном гамильтониане приводит к специфическому расщеплению и модификации подзон одномерных электронов. В [4,5] рассматривалось движение двумерных электронов, проквантованное перпендикулярным к интерфейсам магнитным полем, и были получены формулы, описывающие модификацию уровней Ландау спин-орбитальным взаимодействием.

С другой стороны, в ряде работ (например, см. [6–8]) были экспериментально исследованы электронные состояния в двойных квантовых ямах во внешнем магнитном поле. Информация об электронном спектре получалась на основе измерения магнитосопротивления как функции магнитного поля, прикладываемого вдоль

нормали к слоям гетероструктуры, параллельно слоям или при наличии обеих компонент поля: параллельной и перпендикулярной, — т.е. в наклонных полях. В [6] исследованы спиновые эффекты в квантовом сопротивлении двойной квантовой ямы в наклонных полях и было показано, что величины спиновых расщеплений превышают значения, ожидаемые исходя из величины g -фактора объемного материала.

В связи с этим представляет интерес общее исследование влияния спин-орбитального взаимодействия на движение электронов в магнитном поле в кубических полупроводниках и полупроводниковых структурах.

В данной работе исследованы электронные состояния в магнитном поле в объемных материалах и гетероструктурах с решеткой типа цинковой обманки с учетом спин-орбитального взаимодействия. При помощи метода инвариантов строится общий гамильтониан спин-орбитального взаимодействия электрона с полем решетки во внешнем магнитном поле, аналогичный гамильтониану Дрессельхауза при отсутствии магнитного поля. Это позволяет исследовать спиновые электронные состояния, а следовательно, также транспорт и процессы релаксации в полупроводниковых структурах. В работе исследуются эффекты, к которым приводит данное взаимодействие в одиночной и двойной квантовых ямах, где основную роль в спин-орбитальном взаимодействии играет член Дрессельхауза. Это имеет место, например, в симметричных структурах, где отсутствует вклад от члена Рашбы.

2. Гамильтониан спин-орбитального взаимодействия

Рассмотрим процесс получения гамильтониана электрона в объемном полупроводнике с кристаллической структурой цинковой обманки во внешнем магнитном поле с учетом спин-орбитального взаимодействия. Впервые спектр зонного электрона в магнитном поле был

[¶] E-mail: ppaassshaa@hotmail.com

^{¶¶} E-mail: irina.yassievich@mail.ioffe.ru

исследован в [9]. В [10] было построено выражение для гамильтониана с учетом спин-орбитального взаимодействия, учитывающее магнитное поле феноменологически. Мы последовательно получим гамильтониан, точно учитывающий магнитное поле в предположении, что вызываемая им поправка к волновому вектору порядка характерных величин волновых векторов электронов в зоне проводимости. Это будет сделано путем модификации гамильтониана Дрессельхауза на случай некоммутирования компонент оператора обобщенного импульса, от которых он зависит.

В соответствии с общим правилом описания движения частицы в магнитном поле гамильтониан электрона в магнитном поле при учете спин-орбитального взаимодействия имеет вид:

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2m_0} \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + U(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} \left([\hat{\boldsymbol{\sigma}} \times \nabla U] \cdot \left(\hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{c} \mathbf{A} \right) \right) + \frac{1}{2} g_0 \mu_B (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathcal{H}). \quad (1)$$

Здесь m_0 — масса свободного электрона, \mathbf{A} — векторный потенциал внешнего магнитного поля \mathcal{H} , $U(\mathbf{r})$ — периодический потенциал решетки, g_0 — g -фактор свободного электрона, $g_0 \approx 2$, μ_B — магнетон Бора. Как показано в [1], на основе (1) можно получить гамильтониан в представлении эффективной массы применением кр-метода в любой точке зоны Бриллюэна. При этом из-за наличия магнитного поля следует соответствующим образом модифицировать блоховские базисные функции.

В итоге в приближении эффективной массы гамильтониан записывается в форме:

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2}{2m^*} \hat{\mathbf{K}}^2 + \hat{H}_{\text{SO}}(\hat{\mathbf{K}}) + \frac{1}{2} g \mu_B (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \mathcal{H}), \quad (2)$$

$$\hat{\mathbf{K}} = \hat{\mathbf{k}} + \frac{e}{e\hbar} \mathbf{A}, \quad (3)$$

где $\hbar \hat{\mathbf{K}}$ — обобщенный импульс электрона в электромагнитном поле, $\hat{\mathbf{k}} = -i\partial/\partial\mathbf{r}$, m^* — эффективная масса электрона, g — g -фактор электрона в кристалле в приближении эффективной массы, вычисляемый, например, в рамках модели Кейна [11], а $\hat{H}_{\text{SO}}(\hat{\mathbf{K}})$ — кубический по оператору $\hat{\mathbf{K}}$ оператор спин-орбитального взаимодействия. В случае объемного полупроводника и отсутствия магнитного поля $\hat{\mathbf{K}} = \hat{\mathbf{k}}$, и оператор $\hat{H}_{\text{SO}}(\hat{\mathbf{K}})$ переходит в гамильтониан Дрессельхауза (П.1) [12]. В Приложении описано получение $\hat{H}_{\text{SO}}(\hat{\mathbf{K}})$ методом инвариантов из симметричных соображений, в частности, в случае однородного магнитного поля он может быть взят в виде:

$$\hat{H}_{\text{SO}}(\hat{\mathbf{K}}) = \gamma \left\{ (\hat{K}_y \hat{K}_x \hat{K}_y - \hat{K}_z \hat{K}_x \hat{K}_z) \hat{\sigma}_x + (\hat{K}_z \hat{K}_y \hat{K}_z - \hat{K}_x \hat{K}_y \hat{K}_x) \hat{\sigma}_y + (\hat{K}_x \hat{K}_z \hat{K}_x - \hat{K}_y \hat{K}_z \hat{K}_y) \hat{\sigma}_z \right\}, \quad (4)$$

где γ — константа Дрессельхауза.

Таким образом, мы приходим к окончательному виду гамильтониана спин-орбитального взаимодействия в полупроводниках со структурой цинковой обманки во внешнем магнитном поле. В случае, если магнитное поле \mathcal{H} направлено вдоль оси x , векторный потенциал \mathbf{A} может быть выбран в виде:

$$\mathbf{A} = (0 \quad -\mathcal{H}z \quad 0),$$

и (4) приобретает форму:

$$\hat{H}_{\text{SO}}(\hat{\mathbf{k}}, \mathcal{H}) = \gamma \left\{ \hat{\sigma}_x \left[\hat{k}_x \left(\hat{k}_y - \frac{m^* \omega z}{\hbar} \right)^2 - \hat{k}_x \hat{k}_z^2 \right] + \hat{\sigma}_y \left[\hat{k}_z \left(\hat{k}_y - \frac{m^* \omega z}{\hbar} \right) \hat{k}_z - \hat{k}_x^2 \left(\hat{k}_y - \frac{m^* \omega z}{\hbar} \right) \right] + \hat{\sigma}_z \left[\hat{k}_x^2 \hat{k}_z - \left(\hat{k}_y - \frac{m^* \omega z}{\hbar} \right) \hat{k}_z \left(\hat{k}_y - \frac{m^* \omega z}{\hbar} \right) \right] \right\}. \quad (5)$$

Здесь $\omega = e\mathcal{H}/(m^*c)$ — циклотронная частота электрона. Аналогичное выражение было получено в [10] путем симметризации гамильтониана Дрессельхауза. В случае же неоднородного магнитного поля в гамильтониане появляется еще одно слагаемое с дополнительной константой ξ , содержащее производные от магнитного поля по пространственным переменным:

$$\hat{H}'_{\text{SO}} = \xi (\hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \{\nabla, \mathcal{H}\}),$$

где $\{\mathbf{a}, \mathbf{b}\} = (a_y b_z + a_z b_y, a_z b_x + a_x b_z, a_x b_y + a_y b_x)$ — „ковекторное“ произведение.

3. Электронные состояния в одиночной квантовой яме

Исследуем прежде всего эффекты, к которым приводит рассматриваемое взаимодействие (5) в одиночной квантовой яме, когда магнитное поле направлено вдоль одной из кристаллографических осей в плоскости интерфейсов.

Пусть одиночная квантовая яма выращена вдоль направления [001], координатные оси x, y и z направим вдоль кристаллографических осей [100], [010] и [001] соответственно, и пусть магнитное поле направлено по оси x : $\mathcal{H} = \mathcal{H}e_x$. Координатная часть волновой функции электрона представляет собой произведение бегущей волны, описывающей свободное движение в плоскости интерфейсов, и множителя, определяющего размерное квантование вдоль оси z :

$$\psi = e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \mathbf{q}} u(z) \chi. \quad (6)$$

Здесь $\mathbf{k}_{\parallel} = (k_x, k_y)$, $\mathbf{q} = (x, y)$, χ — спинор, зависящий от \mathbf{k}_{\parallel} .

Будем рассматривать электроны вблизи дна двумерной подзоны, образованной уровнем размерного квантования в яме. Поэтому волновые вектора электронов в плоскости интерфейсов значительно меньше характерной обратной длины затухания волновой функции в

направлении оси z . В этом приближении гамильтониан спин-орбитального взаимодействия (5) записывается в виде:

$$\hat{H}_{SO} = \gamma(k_x \hat{\sigma}_x - k_y \hat{\sigma}_y) \frac{\partial^2}{\partial z^2} - \gamma \frac{m^* \omega}{\hbar} \left(\frac{\partial}{\partial z} z \frac{\partial}{\partial z} \right) \hat{\sigma}_y + i\gamma \left(\frac{m^* \omega}{\hbar} \right)^2 \left(z \frac{\partial}{\partial z} z \right) \hat{\sigma}_z. \quad (7)$$

Пренебрегая взаимодействием с другими подзонами размерного квантования и используя тот факт, что матричные элементы операторов $[(\partial/\partial z)z(\partial/\partial z)]$ и $[z(\partial/\partial z)z]$, вычисляемые на волновой функции $u(z)$, равны нулю, получаем матричную форму гамильтониана для двумерных носителей в подзоне размерного квантования:

$$H = \begin{pmatrix} E_0 + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} + V_{z^2} & \frac{\hbar\omega\tilde{g}}{2} + \alpha_{SO}k_+ \\ \frac{\hbar\omega\tilde{g}}{2} + \alpha_{SO}k_- & E_0 + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} + V_{z^2} \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Здесь E_0 — уровень размерного квантования в яме, $V_{z^2} = (1/2)m^*\omega^2\langle z^2 \rangle$ — квадратичный по магнитному полю диамагнитный сдвиг уровня $\tilde{g} = (m^*/m_0)g$ — эффективный g -фактор, $\alpha_{SO} = \gamma\langle |\partial^2/\partial z^2| \rangle$ — константа спин-орбитального взаимодействия данной задачи, $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$. Гамильтониан (8) приводит к следующему выражению для энергетического спектра двумерных электронов в простой квантовой яме:

$$E_{\pm} = E_0 + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} + V_{z^2} \pm \sqrt{\left(\frac{\hbar\omega\tilde{g}}{2} \right)^2 + \alpha_{SO}^2 k_{\parallel}^2 + \hbar\omega\tilde{g}\alpha_{SO}k_x}. \quad (9)$$

Данный спектр представляет собой сумму диамагнитного сдвига на V_{z^2} обычного квадратичного спектра и смещенной по оси k_x на $\hbar\omega\tilde{g}/\alpha_{SO}$ спин-орбитальной поправки. На рис. 1 представлен спектр (9), рассчитанный для квантовых ям в GaAs/InGaAs и AlGaSb/GaSb-гетероструктурах. В расчетах значения всех параметров выбирались в соответствии с приведенными в [11]. При этом за значение константы Дрессельхауза во всей структуре принималось ее значение для ямы, которое равно $43 \text{ эВ} \cdot \text{Å}^3$ для GaAs/InGaAs-гетероструктуры и $187 \text{ эВ} \cdot \text{Å}^3$ для AlGaSb/GaSb-гетероструктуры. Из рис. 1 видно, что учет спин-орбитального взаимодействия приводит к сдвигу минимумов верхней и нижней поверхностей зеемановски расщепленной подзоны размерного квантования и появлению точки вырождения спектра (при отсутствии магнитного поля этой точкой является $k_{\parallel} = 0$). Также видно, что сила описываемых эффектов для ямы на основе GaSb/AlGaSb-гетероструктуры значительно больше, чем для ямы на основе GaAs/InGaAs-гетероструктуры.

Также были найдены соответствующие подзонам (9) спиноры χ_{\pm} , диагонализующие матричный гамильтониан (8):

$$\chi_{\pm}(\mathbf{k}_{\parallel}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm \sqrt{\frac{1+ak_-}{1+ak_+}} \end{pmatrix}, \quad (10)$$

где $a = 2\alpha_{SO}/(\hbar\omega\tilde{g})$ — параметр, характеризующий сравнительное влияние зеемановского и спин-орбитальных членов. При включении магнитного поля a меняется от бесконечности до нуля. Предельный переход по $a \rightarrow \infty$ переводит (10) в собственные спиноры гамильтониана Дрессельхауза без магнитного поля, полученные в [13].

Спины электрона в описанных состояниях χ_{\pm} равны:

$$\mathbf{s}_{\pm}(\mathbf{k}_{\parallel}) = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \pm \frac{1 + ak_{\parallel} \cos \varphi}{\sqrt{1 + a^2 k_{\parallel}^2 + 2ak_{\parallel} \cos \varphi}} \\ \mp \frac{ak_{\parallel} \sin \varphi}{\sqrt{1 + a^2 k_{\parallel}^2 + 2ak_{\parallel} \cos \varphi}} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (11)$$

где φ — полярный угол в плоскости волновых векторов \mathbf{k}_{\parallel} . Из (11) видно, что спины состояний „+“ и „–“ противоположно направлены, лежат в плоскости интерфейсов и зависят от полярного угла φ . При этом оказывается, что если $ak_{\parallel} > 1$, то спин каждого электронного состояния при изменении направления волнового вектора пробегает всю окружность радиуса $1/2$, если же $ak_{\parallel} < 1$, то происходит прецессия в интервале углов для состояния „+“ около положительного направления оси x , а для состояния „–“ — около отрицательного направления оси x . Напомним, что ось x является направлением магнитного поля.

4. Электронные состояния в двойной квантовой яме

Исследуем теперь электронные состояния в двойной квантовой яме при наличии магнитного поля в плоскости интерфейсов. Направление нормали к квантовой яме, магнитного поля и координатных осей выберем так же, как и при рассмотрении одиночной квантовой ямы.

Волновые функции и гамильтониан в этом случае также имеют вид (6) и (7) (аналогично случаю одиночной квантовой ямы рассматриваются электроны с малой кинетической энергией). В результате туннельной связи через барьер, разделяющий ямы, основное состояние размерного квантования в каждой яме расщепляется на два состояния: симметричное $\Psi_s = e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{r}} u_s(z) \chi_s$ и антисимметричное $\Psi_a = e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{r}} u_a(z) \chi_a$. Будем рассматривать две подзоны, образованные этими двумя состояниями. Взаимодействием с остальными подзонами размерного квантования пренебрежем. После усреднения по функциям u_s и u_a гамильтониан двумерных электронов в этой

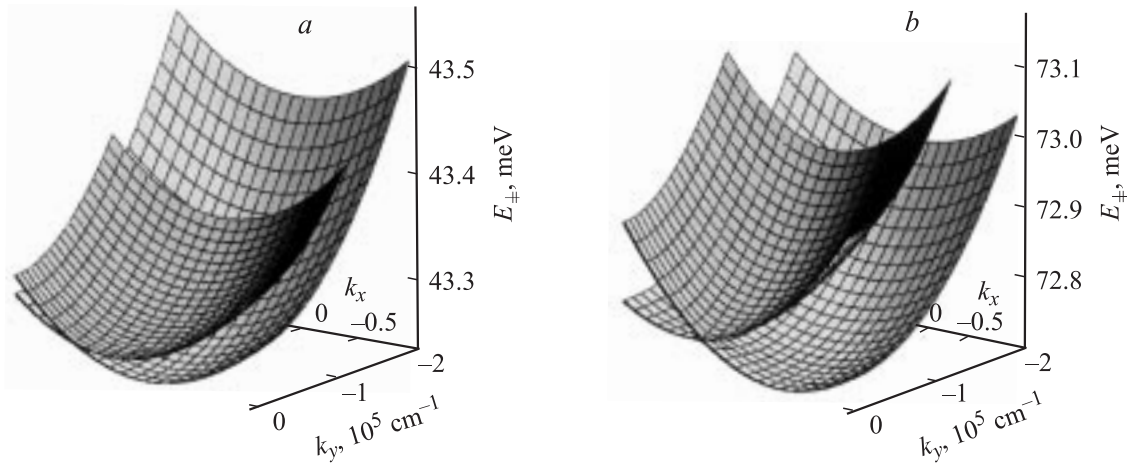


Рис. 1. Спектр электронов в одиночной квантовой яме в гетероструктурах: *a* — GaAs/In_{0.18}Ga_{0.82}As/GaAs, *b* — Al_{0.15}Ga_{0.85}Sb/GaSb/Al_{0.15}Ga_{0.85}Sb. Ширина ямы равна 5 нм, величина магнитного поля 0.05 Тл. Верхние поверхности соответствуют „+“-состояниям, нижние — „-“-состояниям.

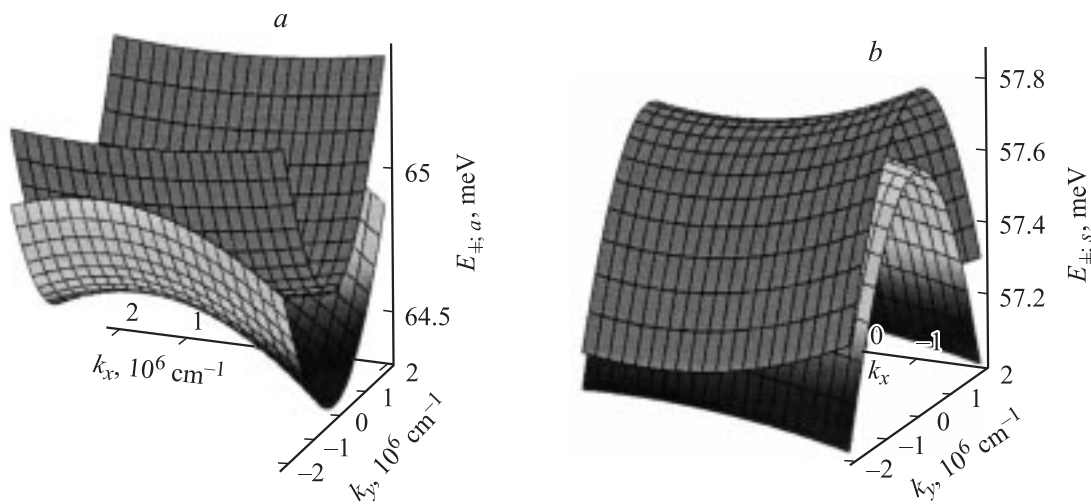


Рис. 2. Спиновые поправки к двумерному спектру $\hbar^2 k_{\parallel}^2 / (2m^*)$ электронов в двойной квантовой яме для подзон, соответствующих: *a* — антисимметричному и *b* — симметричному состоянию. Расчет выполнен для гетероструктуры GaAs/In_{0.18}Ga_{0.82}As/GaAs/In_{0.18}Ga_{0.82}As/GaAs. Ширины ям 5 нм, ширина барьера 7 нм, величина магнитного поля 1 Тл. Верхние поверхности соответствуют „+“-состояниям, нижние — „-“-состояниям.

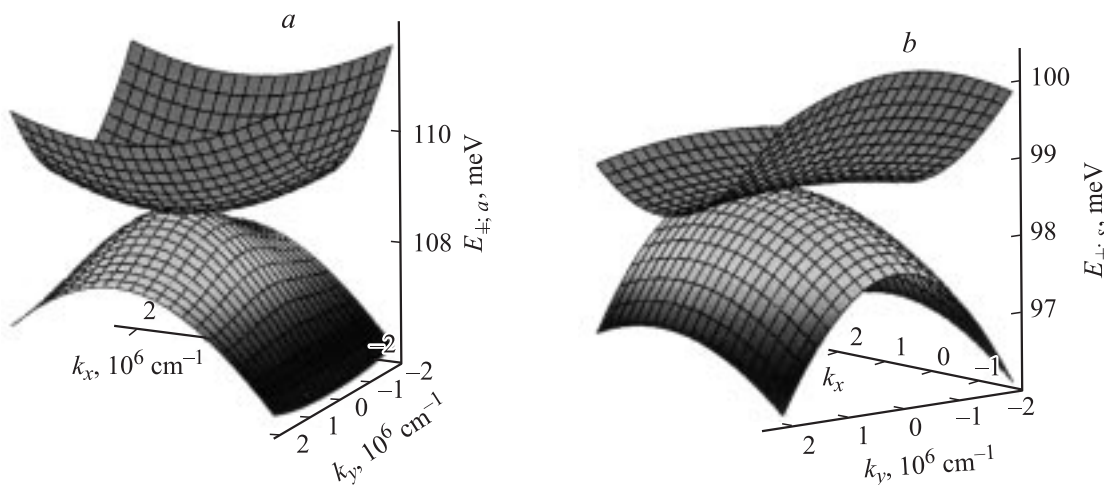


Рис. 3. Спиновые поправки к двумерному спектру $\hbar^2 k_{\parallel}^2 / (2m^*)$ электронов в двойной квантовой яме для подзон, соответствующих: *a* — антисимметричному и *b* — симметричному состоянию. Расчет выполнен для гетероструктуры Al_{0.15}Ga_{0.85}Sb/GaSb/Al_{0.15}Ga_{0.85}Sb/GaSb/Al_{0.15}Ga_{0.85}Sb. Ширины ям 5 нм, ширина барьера 7 нм, величина магнитного поля 1 Тл. Верхние поверхности соответствуют „+“-состояниям, нижние — „-“-состояниям.

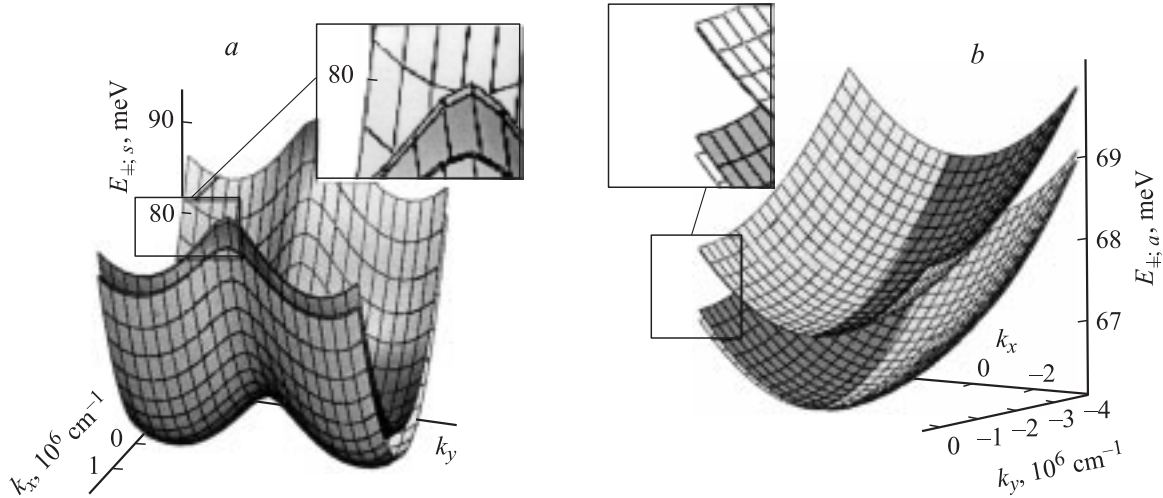


Рис. 4. Спин-расщепленный энергетический спектр электрона в подзоне: *a* — симметричного состояния при магнитном поле, равном 14 Тл, и *b* — антисимметричного состояния при магнитном поле, равном 6 Тл, для исследованной в [6] GaAs/InGaAs-гетероструктуры. Указанные магнитные поля соответствуют наблюдавшимся максимуму и минимуму магнитосопротивления. Приведен результат расчета спектра верхней и нижней спиновых подзон с учетом и без учета спин-орбитального взаимодействия.

системе принимает форму:

$$H = \begin{pmatrix} E_a + V_{aa} + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} & \frac{1}{2} \omega \tilde{g} \hbar + \alpha_a k_+ & \beta k_y - ic & ib \\ \frac{1}{2} \omega \tilde{g} \hbar + \alpha_a k_- & E_a + V_{aa} + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} & -ib & \beta k_y + ic \\ \beta k_y + ic & ib & E_s + V_{ss} + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} & \frac{1}{2} \omega \tilde{g} \hbar + \alpha_s k_+ \\ -ib & \beta k_y - ic & \frac{1}{2} \omega \tilde{g} \hbar + \alpha_s k_- & E_s + V_{ss} + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} \end{pmatrix}, \quad (12)$$

где

$$\begin{aligned} \beta &= \hbar \omega \langle \Psi_s | z | \Psi_a \rangle, \\ V_{ss,aa} &= \frac{1}{2} m^* \omega^2 \langle \Psi_s, \Psi_a | z^2 | \Psi_s, \Psi_a \rangle, \\ \alpha_{s,a} &= \gamma \langle \Psi_s, \Psi_a | \frac{\partial^2}{\partial z^2} | \Psi_s, \Psi_a \rangle, \\ b &= \gamma \left(\frac{e \mathcal{H}}{\hbar c} \right) \langle \Psi_s | \frac{\partial}{\partial z} z \frac{\partial}{\partial z} | \Psi_a \rangle, \\ c &= \gamma \left(\frac{e \mathcal{H}}{\hbar c} \right)^2 \langle \Psi_s | z \frac{\partial}{\partial z} z | \Psi_a \rangle, \end{aligned}$$

E_s и E_a — уровни энергии симметричного и антисимметричного состояния в отсутствие магнитного поля.

На основе гамильтониана (12) было проведено вычисление спектра электронов в двойной квантовой яме в гетероструктуре состава GaAs/In_{0.18}Ga_{0.82}As/GaAs/In_{0.18}Ga_{0.82}As/GaAs, с ямами шириной 5 нм и барьером шириной 7 нм, которая экспериментально исследовалась в работе [6], а также для двойной квантовой ямы в гетероструктуре состава Al_{0.15}Ga_{0.85}Sb/GaSb/Al_{0.15}Ga_{0.85}Sb/GaSb/Al_{0.15}Ga_{0.85}Sb с такими же размерами ям и барьера, где сильны эффекты спин-орбитального взаимодействия. Величина расщепления между уровнями $\Delta = E_a - E_s$ составляет для первой ямы $\Delta = 7.1$ мэВ,

а для второй — $\Delta = 10.4$ мэВ. На рис. 2 и 3 представлен результат вычисления зеемановского расщепления и спин-орбитальных поправок к основному слагаемому $\hbar^2 k_{\parallel}^2 / (2m^*)$ двумерного спектра. Видно, что влияние спин-орбитального взаимодействия на модификацию спектра значительно сильнее в AlGaSb/GaSb-гетероструктуре.

Из (12) можно получить спин-орбитальное расщепление спектра в каждой подзоне размерного квантования при нулевом магнитном поле:

$$\delta E_{s,a;\pm} = \pm \alpha_{s,a} k_{\parallel}. \quad (13)$$

Это расщепление является стандартным расщеплением спектра двумерных носителей спин-орбитальным взаимодействием и впервые было описано в [1].

Также на основе (12) можно получить магнитную деформацию спектра в пренебрежении спин-орбитальным взаимодействием:

$$E_{1,2} = \frac{1}{2} \left[(E_s + E_a + V_{ss} + V_{aa}) \pm \sqrt{(E_s - E_a + V_{ss} - V_{aa})^2 + 4\beta^2 k_y^2} \right], \quad (14)$$

что совпадает с полученными в работе [6].

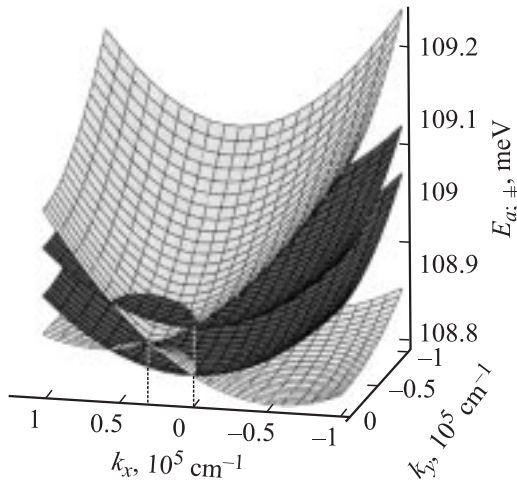


Рис. 5. Расщепленный энергетический спектр электрона в подзоне антисимметричного состояния в AlGaSb/GaSb-гетероструктуре, для которой приведен расчет на рис. 3. Магнитное поле равно 0.1 Тл. Приведены результаты расчета с учетом (светлые поверхности) и для сравнения без учета спин-орбитального взаимодействия (темные поверхности).

Аналитически были найдены поправки к положению энергетических уровней при нулевом волновом векторе относительно энергий $E_s + V_{ss} \pm (\hbar\omega\tilde{g})/2$ и $E_a + V_{aa} \pm (\hbar\omega\tilde{g})/2$:

$$E_{0;a,\pm} = \frac{(c \pm b)^2}{\Delta \pm \omega\tilde{g}\hbar}, \quad E_{0;s,\pm} = -\frac{(c \mp b)^2}{\Delta \mp \omega\tilde{g}\hbar}. \quad (15)$$

Эти поправки определяют энергетический спектр в случае сильных магнитных полей, когда поправки, обусловленные спин-орбитальным взаимодействием, становятся незначительными по сравнению с поправками, обусловленными магнитными членами.

На рис. 4 представлен результат расчета энергетического спектра двумерных электронов в подзоне симметричного и антисимметричного состояния для структуры, исследованной в [6], с учетом и без учета спин-орбитального взаимодействия. Из рисунка видно, что поправки оказываются порядка 0.5 мэВ и наряду с уширением уровней размерного квантования могут служить причиной размытия максимумов и минимумов магнитосопротивления как функции магнитного поля. На рис. 5 приведен результат расчета энергетического спектра в подзоне антисимметричного состояния для вышеописанной GaSb/AlGaSb-гетероструктуры для малых значений волнового вектора. Видно, что поправки, обусловленные спин-орбитальным взаимодействием, принципиально изменяют вид спектра в этой области и являются гораздо более значительными, чем для исследованной в [6] гетероструктуры. Это делает двойные квантовые ямы в гетеросистеме GaSb/AlGaSb актуальными для изучения эффектов, обусловленных комбинацией дополнительных степеней свободы электрона.

5. Заключение

Исследовано влияние спин-орбитального взаимодействия на электронные состояния в гетероструктурах на основе материалов с решеткой цинковой обманки. Расчеты были проведены для одиночной и двойной квантовых ям на основе GaAs/InGaAs- и AlGaSb/GaSb-гетероструктур.

Авторы выражают благодарность В.И. Перелю и Е.Л. Ивченко за обсуждение в процессе работы над статьей. Работа выполнена при поддержке грантов РФФИ и программ РАН. П.С. Алексеев благодарит фонд „Династия“ (ICFRM) и фонд Ж.И. Алфёрова.

Приложение

Получение общей формы кубического гамильтониана в кристаллах симметрии T_d

Для получения гамильтониана спин-орбитального взаимодействия в магнитном поле необходимо обобщить гамильтониан Дрессельхауза:

$$\begin{aligned} \hat{H}_D(\hat{\mathbf{k}}) = & \gamma \{ \hat{\sigma}_x \hat{k}_x (\hat{k}_y^2 - \hat{k}_z^2) + \hat{\sigma}_y \hat{k}_y (\hat{k}_z^2 - \hat{k}_x^2) \\ & + \hat{\sigma}_z \hat{k}_z (\hat{k}_x^2 - \hat{k}_y^2) \} \end{aligned} \quad (П.1)$$

на случай, если оператор волнового вектора $\hat{\mathbf{k}}$ приобретает добавку $[e/(c\hbar)]\mathbf{A}$, и разные компоненты нового аргумента (П.1) перестают коммутировать между собой.

Получим общее выражение для гамильтониана, действующего в пространстве спиноров и зависящего от произвольного трижды полярного тензора третьего ранга K_{ijk} , используя метод инвариантов [14]. Будем искать его в виде линейной комбинации базисных операторов \hat{I} , $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$ и $\hat{\sigma}_z$:

$$\begin{aligned} \hat{H}^3(K_{ijk}) = & a_{ijk} K_{ijk} \hat{I} + a_{ijk}^x K_{ijk} \hat{\sigma}_x \\ & + a_{ijk}^y K_{ijk} \hat{\sigma}_y + a_{ijk}^z K_{ijk} \hat{\sigma}_z. \end{aligned} \quad (П.2)$$

При этом (П.2) должен быть инвариантен относительно всех преобразований группы T_d и инверсии времени. Эти требования приводят к тому, что часть коэффициентов a_{ijk} и a_{ijk}^l окажутся нулями, а остальные не будут независимы и выразятся через несколько констант.

Существует общий метод нахождения коэффициентов в (П.2). При указанном выборе базисных матриц необходимо, чтобы сумма $a_{ijk} K_{ijk}$ преобразовывалась по представлению A_1 группы T_d , соответствующему скаляру, а суммы $a_{ijk}^x K_{ijk}$, $a_{ijk}^y K_{ijk}$ и $a_{ijk}^z K_{ijk}$ — по представлению F_1 , соответствующему аксиальному вектору. Таким образом, существует два возможных метода построения $\hat{H}^3(K_{ijk})$: непосредственный поиск соотношений, которым должны удовлетворять коэффициенты в (П.2) из-за инвариантности гамильтониана при преобразованиях группы T_d и инверсии времени, или построение

Коэффициенты разложения кубического гамильтониана по матрицам Паули и компонентам произвольного тензора третьего ранга:

| ijk | a_{ijk}^x | a_{ijk}^y | a_{ijk}^z |
|-------|-------------|-------------|-------------|
| xxx | | | |
| xyx | | $-c$ | |
| xxz | | | c |
| xyx | | $-b$ | |
| xyy | a | | |
| xzy | | | |
| xzz | | | b |
| xzx | | | |
| xzy | | | |
| xzz | $-a$ | | |
| yxx | | $-a$ | |
| yxy | b | | |
| yxz | | | |
| yxx | | c | |
| yyy | | | |
| yyz | | | $-c$ |
| yzx | | | |
| yzx | | | |
| yzx | | a | $-b$ |
| zxx | | | a |
| zxy | | | |
| zxx | $-b$ | | |
| zyx | | | |
| zyy | | | $-a$ |
| zyz | | b | |
| zzx | $-c$ | | |
| zzx | | c | |
| zzz | | | |

линейных комбинаций тензора K_{ijk} , преобразующихся по неприводимым представлениям группы T_d , а затем отдельный учет инвариантности при инверсии времени.

Выясним, каково число N_a независимых констант, через которые выразятся коэффициенты a_{ijk}^l . На основании сказанного выше N_a равно числу линейно независимых комбинаций компонент тензора K_{ijk} , преобразующихся по представлению F_1 . Используя теорию характеров, найдем число таких комбинаций без их поиска в явном виде. Для этого разложим представление $F_2 \times F_2 \times F_2$, по которому преобразуется тензор K_{ijk} , по неприводимым представлениям группы T_d :

$$F_2 \times F_2 \times F_2 = A_1 + A_2 + 2E + 3F_1 + 4F_2.$$

Таким образом, число искомых линейных комбинаций равно трем, и, следовательно, $N_a = 3$. Основываясь на этом результате, продолжим построение $\hat{H}^3(K_{ijk})$ непосредственным поиском соотношений для коэффициентов a_{ijk} и a_{ijk}^l .

Волновые функции с учетом спина в Γ -точке зоны проводимости преобразуются по представлению $\mathcal{D}_{1/2}(g)$,

так что (П.2) должен удовлетворять соотношениям

$$\exp(-i\varphi_g \cdot \sigma/2) \hat{H}^3(g(K_{ijk})) \times \exp(i\varphi_g \cdot \sigma/2) = \hat{H}^3(K_{ijk}) \quad (\text{П.3})$$

для каждого элемента g группы T_d и соотношению

$$\left(\hat{\sigma}_y^{-1} \hat{H}^3(In(K_{ijk})) \hat{\sigma}_y \right)^* = \hat{H}^3(K_{ijk}), \quad (\text{П.4})$$

описывающему инвариантность при инверсии времени. Здесь φ_g — угол поворота при преобразовании g , а In — операция, которой подвергается тензор при инверсии времени.

Можно заметить, что для выполнения соотношений (П.3) и (П.4) для всех элементов группы T_d достаточно их выполнения только для образующих элементов группы, которыми являются, например, поворот вокруг одной из высот тетраэдра g_1 и одно из зеркально-поворотных преобразований g_2 . Таким образом, необходимо последовательно подставить в (П.3) и (П.4) вместо g g_1 и g_2 и 27 линейно независимых наиболее простых наборов величин K_{ijk} . В результате получатся соотношения для коэффициентов a_{ijk} и a_{ijk}^l .

Соотношение (П.4) приведет к тому, что все коэффициенты a_{ijk} обратятся в 0. Можно показать, что соотношение (П.3) переписывается в виде:

$$M \mathbf{a}_{ijk} g(K_{ijk}) = \mathbf{a}_{ijk} K_{ijk}, \quad (\text{П.5})$$

где по повторяющимся индексам подразумевается суммирование и

$$\mathbf{a}_{ijk} = \begin{pmatrix} a_{ijk}^x \\ a_{ijk}^y \\ a_{ijk}^z \end{pmatrix}, \quad (\text{П.6})$$

$$M = \begin{pmatrix} d_x & c_{xy} & c_{xz} \\ c_{xy} & d_y & c_{yz} \\ c_{xz} & c_{yz} & d_z \end{pmatrix}, \quad (\text{П.7})$$

$$c_{ij} = \frac{2}{\varphi} \sin\left(\frac{\varphi}{2}\right) \left[\varphi_i \varphi_j \frac{1}{\varphi} \sin\left(\frac{\varphi}{2}\right) - \varphi_k \cos\left(\frac{\varphi}{2}\right) \right], \quad (\text{П.8})$$

$$d_i = \cos^2\left(\frac{\varphi}{2}\right) + \frac{1}{\varphi^2} \sin^2\left(\frac{\varphi}{2}\right) \left[\varphi_i^2 - \varphi_{i+1}^2 - \varphi_{i+2}^2 \right]. \quad (\text{П.9})$$

В (П. 9) подразумевается циклическая перестановка индексов x, y, z , а в (П.8) эти же индексы не равны друг другу.

Результат анализа (П.5) можно представить в виде таблицы значений коэффициентов $a_{ijk}^x, a_{ijk}^y, a_{ijk}^z$. Пустые клетки в таблице означают равенство нулю соответствующего коэффициента.

В итоге получается выражение:

$$\begin{aligned} \hat{H}^3 = & [a(K_{xyy} - K_{xzz}) + b(K_{yxy} - K_{zxx}) \\ & + c(K_{yyx} - K_{zxx})] \hat{\sigma}_x + [a(K_{yzz} - K_{yxx}) \\ & + b(K_{zyz} - K_{xyx}) + c(K_{zzy} - K_{xxy})] \hat{\sigma}_y \\ & + [a(K_{zxx} - K_{zyy}) + b(K_{xzx} - K_{yzy}) \\ & + c(K_{xxz} - K_{yyz})] \hat{\sigma}_z. \end{aligned} \quad (\text{П.10})$$

Пусть теперь тензор K_{ijk} представляет собой куб тензорного произведения некоторого векторного эрмитова оператора, например, обобщенного импульса частицы в электромагнитном поле:

$$K_{ijk} = \hat{K}_i \hat{K}_j \hat{K}_k.$$

В случае, если \hat{K}_i коммутируют, из (П.10) мы легко получаем выражение, пропорциональное (П.1). В представляющем интерес случае, когда \hat{K}_i не коммутируют, выбирается $a = c$ из требования эрмитовости всего гамильтониана (П.10). Потребуем также, чтобы гамильтониан (П.10) в отсутствии магнитного поля, когда различные компоненты \hat{K}_i коммутируют друг с другом, переходил в обычный гамильтониан Дрессельхауза (П.1). В итоге получается, что в (П.10) остается одна дополнительная константа, которую удобно выбрать в безразмерном виде следующим образом:

$$\begin{aligned} \hat{H}^3 = \gamma \{ & [\mu(\hat{K}_x \hat{K}_y \hat{K}_z - \hat{K}_x \hat{K}_z \hat{K}_y) \\ & + (1 - 2\mu)(\hat{K}_y \hat{K}_x \hat{K}_y - \hat{K}_z \hat{K}_x \hat{K}_z) + \mu(\hat{K}_y \hat{K}_y \hat{K}_x - \hat{K}_z \hat{K}_z \hat{K}_x)] \hat{\sigma}_x \\ & + [\mu(\hat{K}_y \hat{K}_z \hat{K}_z - \hat{K}_y \hat{K}_x \hat{K}_x) + (1 - 2\mu)(\hat{K}_z \hat{K}_y \hat{K}_z - \hat{K}_x \hat{K}_y \hat{K}_x) \\ & + \mu(\hat{K}_z \hat{K}_z \hat{K}_y - \hat{K}_x \hat{K}_x \hat{K}_y)] \hat{\sigma}_y + [\mu(\hat{K}_z \hat{K}_x \hat{K}_x - \hat{K}_z \hat{K}_y \hat{K}_y) \\ & + (1 - 2\mu)(\hat{K}_x \hat{K}_z \hat{K}_x - \hat{K}_y \hat{K}_z \hat{K}_y) \\ & + \mu(\hat{K}_x \hat{K}_x \hat{K}_z - \hat{K}_y \hat{K}_y \hat{K}_z)] \hat{\sigma}_z \}. \end{aligned} \quad (\text{П.11})$$

В случае, когда $\hat{\mathbf{K}} = \hat{\mathbf{k}} + [e\mathbf{A}/(c\hbar)]$ и магнитное поле однородно, выражение (П.11) не зависит от параметра μ , поэтому в нашей задаче выбор его произволен. Положим $\mu = 0$, так что искомое выражение можно взять в виде (4).

Список литературы

- [1] Э.И. Рашба. ФТТ, **2** (6), 1224 (1960).
- [2] Ю.А. Бычков, Э.И. Рашба. Письма ЖЭТФ, **39** (2), 66 (1984).
- [3] Yu.V. Pershin, J.A. Nesteroff, V. Privman. Phys. Rev. B, **69**, 121 306 (2004).
- [4] M. Valin-Rodrigues, R.G. Nazmitdinov. Phys. Rev. B, **73**, 235 306 (2006).
- [5] M. Zarea, S.E. Ulloa. Phys. Rev. B, **72**, 085 342 (2005).
- [6] М.В. Якунин, Г.А. Альшанский, Ю.Г. Арапов, В.Н. Неведров, Г.И. Хариус, Н.Г. Шелушинина, Б.Н. Звонков, Е.А. Ускова, А. де Виссер, Л. Пономаренко. ФТП, **39** (1), 118 (2005).
- [7] I.S. Millard, N.K. Patel, C.L. Foden, M.Y. Simmons, D.A. Ritchie, G.A.S. Jones, M. Pepper. Phys. Rev. B, **55**, 13 401 (1997).
- [8] N.E. Harff, J.A. Simmons, S.K. Lyo, J.F. Klem, G.S. Boebinger, L.N. Pfeiffer, K.W. West. Phys. Rev. B, **55**, 13 405 (1997).
- [9] И.М. Лифшиц, А.М. Косевич. ЖЭТФ, **29**, 6(12), 730 (1955).

- [10] Б.П. Захарченя, Е.Л. Ивченко, Ф.Я. Рыскин, Ф.В. Варфоломеев. ФТТ, **18** (1), 230 (1976).
- [11] E.L. Ivchenko, G.E. Pikus. *Superlattices and Other Heterostructures. Symmetry and Optical Phenomena* (Springer, Berlin, 1995), [2nd ed., 1997].
- [12] G. Dresselhaus. Phys. Rev., **100**, 580 (1955).
- [13] V.I. Perel', S.A. Tarasenko, I.N. Yassievich, S.D. Ganichev, V.V. Bel'kov, W. Prettl. Phys. Rev. B, **67**, 201 304 (2003).
- [14] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках* (М., Наука, 1972).

Редактор Л.В. Беляков

Influence of the spin-orbit interaction on the spectrum of 2-D electrons in the magnetic field

P.S. Alekseev^{*,+}, M.V. Yakunin[•], I.N. Yassievich^{*}

^{*} Ioffe Physicotechnical Institute,
Russian Academy of Sciences,
194021 St. Petersburg, Russia

⁺ St. Petersburg State Polytechnical University,
195251 St. Petersburg, Russia

[•] Institute of Metal Physics,
Ural Branch of Russian Academy of Science,
620219 Ekaterinburg, Russia

Abstract Influence of the external magnetic field on electron states in zinc blend lattice semiconductors with taking into account the intrinsic spin coupling has been investigated. The spin-orbit interaction Hamiltonian is built using the method of invariants of point groups. Also the effects of spectrum modifications in single and double quantum wells in magnetic field, parallel to interfaces, are considered.