

УДК 538.955

Ж. А. Девизорова<sup>1,2</sup>, В. А. Волков<sup>2,1</sup><sup>1</sup>Московский физико-технический институт (государственный университет)<sup>2</sup>Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН

## Нелинейное и анизотропное спиновое расщепление электронных уровней Ландау в наноструктурах на основе GaAs

Из общих требований получено оригинальное граничное условие для эффективных волновых функций, являющихся огибающими полной волновой функции электрона в кристалле. Это условие описывает атомарно резкую гетерограницу в гетеропереходе GaAs / Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As и зависит от единственной феноменологической константы. Показано, что вследствие резкости гетерограницы и спинового расщепления зоны проводимости, которое обусловлено отсутствием центра инверсии в системе, спиновое расщепление электронных уровней Ландау в двумерной электронной системе является анизотропным и нелинейным по  $B$ . Определены поправки к тензору  $g$ -фактора электрона, линейные по магнитному полю. Показано, что они зависят от объемной константы кубического по импульсу спинового расщепления зоны проводимости (константа Дрессельхауза) параметра, характеризующего границу  $R$ , и от номера соответствующего уровня Ландау. Результаты коррелируют с экспериментом.

**Ключевые слова:** гетероструктура, двумерная электронная система, спинтроника, фактор Ланде, уровень Ландау.

### 1. Введение

Магнитное поле  $B$  приводит, как известно, к зеемановскому расщеплению уровней энергии электронов. Обычно величина расщепления линейно зависит от  $B$ , причем коэффициент пропорциональности равен магнетону Бора, умноженному на фактор Ланде (или  $g$ -фактор). Для электрона в кристалле  $g$ -фактор отличается от своего значения в вакууме, где  $g = 2$ , из-за спин-орбитального взаимодействия и существенно зависит от электронной структуры [1]. Исследования спинового расщепления спектра электронов в наноструктурах важны не только для фундаментальной физики, но и для становления спинтроники. В работе [2] обнаружено анизотропное и нелинейное по  $B$  спиновое расщепление электронных уровней Ландау в наноструктурах на основе асимметрично легированной квантовой ямы на основе гетероструктуры GaAs/AlGaAs. Причина нелинейности неясна. Настоящая работа посвящена теоретическому объяснению этого необычного результата.

### 2. Граничное условие для набора огибающих волновой функции электрона

Рассмотрен односторонне легированный гетеропереход GaAs / Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As. Потенциал, зависящий от  $z$ -координаты, моделируется треугольной ямой с одной вертикальной (в точке  $z = 0$ ) и другой наклонной  $V(z) = eFz$ , где  $F > 0$ , при  $z > 0$  стенками (рис. 1).

Ранее подобные структуры описывались в рамках приближения эффективной массы, которое считалось применимым во всем пространстве [3]. Однако оно оказывается неприменимым для описания атомарно резкой гетерограницы. Поэтому мы предлагаем, следуя [4], считать приближение эффективной массы применимым везде, кроме границы, а границу описывать граничным условием для эффективных волновых функций, которое получено нами из общих соображений эрмитовости однозонного гамильтониана на полупространстве и инвариантности по отношению к обращению времени.

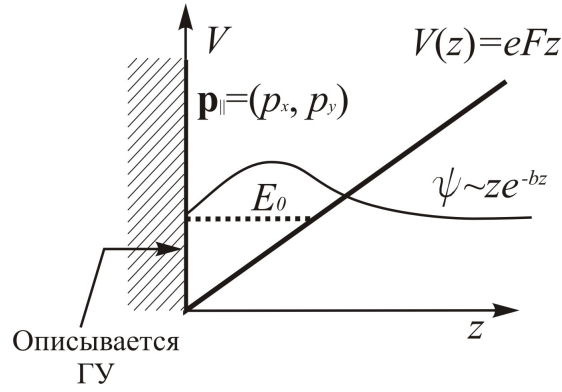


Рис. 1. Форма модельной потенциальной ямы

Однозонный гамильтониан электрона проводимости действует на спиновую эффективную волновую функцию и с учетом вкладов, зависящих от спина, имеет следующий вид:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m^*} + V(z) + \hat{H}_D + \hat{H}_R, \quad (1)$$

где  $\hat{H}_D$  — объемный гамильтониан Дрессельхауза, который описывает спиновое расщепление зоны проводимости полупроводника без центра инверсии (типа  $A_3B_5$ ):

$$\hat{H}_D = \frac{\gamma_c}{\hbar^3} (\sigma_x p_x (p_y^2 - \hat{p}_z^2) + \sigma_y p_y (\hat{p}_z^2 - p_x^2) + \sigma_z \hat{p}_z (p_x^2 - p_y^2)), \quad (2)$$

где  $p_x, p_y$  — компоненты квазиимпульса электрона в плоскости двумерного электронного газа,  $\hat{p}_z$  — оператор импульса в направлении размерного квантования,  $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$  — матрицы Паули,  $\gamma_c$  — константа кубичного по  $p$  спинового расщепления зоны проводимости (константа Дрессельхауза).

$\hat{H}_R$  — гамильтониан типа Рашбы [5]:

$$\hat{H}_R = a_R (\sigma_x p_y - \sigma_y p_x) \partial_z V(z), \quad (3)$$

где  $a_R$  — константа, определяемая параметрами зонной структуры и пропорциональная величине спин-орбитального расщепления.

Из условия эрмитовости гамильтониана на правом полупространстве следует условие, которому должна удовлетворять любая пара его собственных функций  $\varphi$  и  $\psi$ :

$$\begin{aligned} & [(\psi^\dagger \partial_z \varphi - (\partial_z \psi)^\dagger \varphi) + \frac{2m^* \gamma_c}{\hbar^3} (\psi^\dagger (\sigma_y p_y - \sigma_x p_x) \partial_z \varphi - (\partial_z \psi)^\dagger (\sigma_y p_y - \sigma_x p_x) \varphi) + \\ & + i \frac{2m^* \gamma_c}{\hbar^4} \psi^\dagger \sigma_z (p_x^2 - p_y^2) \varphi] |_{z=0} = 0. \end{aligned} \quad (4)$$

Здесь  $\psi^\dagger = (\psi_1^*, \psi_2^*)$ , а выражение типа  $\psi^\dagger \varphi$  означает биспинорную комбинацию вида  $\psi_1^* \varphi_1 + \psi_2^* \varphi_2$ .

Как можно заметить, условия (4) недостаточно для определения граничного условия. Потребуем инвариантность условия (4) по отношению к обращению времени (оператор инверсии времени  $\hat{T} = i\sigma_y \hat{K}$ , где  $\hat{K}$  — оператор комплексного сопряжения). Таким образом, из (4) получим граничное условие, которое будет определяться единственной константой  $R$ , имеющей размерность длины:

$$\left[ 1 + i \frac{R \hat{p}_z}{\hbar} + i \frac{2m^* \gamma_c R}{\hbar^4} (\sigma_y p_y - \sigma_x p_x) \hat{p}_z + i \frac{m^* \gamma_c R}{\hbar^4} \sigma_z (p_x^2 - p_y^2) \right] \varphi \Big|_{z=0} = 0. \quad (5)$$

В полном граничном условии также необходимо учитывать спин-орбитальное взаимодействие с границей. Такой дополнительный спин-зависимый вклад не может быть получен

в рамках однозонного приближения. Его вычисление произведено в работе [6] для полупроводника с центром инверсии. С учетом этого вклада полное граничное условие для полупроводника без центра инверсии примет вид

$$(1 + \hat{G}_1 + \hat{G}_2 + \hat{G}_3)\varphi|_{z=0} = 0, \quad (6)$$

$$\hat{G}_1 = i \frac{R\hat{p}_z}{\hbar},$$

$$\hat{G}_2 = \frac{\chi R}{\hbar}(\sigma_y p_x - \sigma_x p_y),$$

$\chi$  — отношение разности спинового расщепления электронного спектра в полупроводнике и аналогичной величины в вакууме к интервалу между уровнями Ландау. Для GaAs

$$\chi = (g_0 - g^*) \frac{m^*}{2m_0} \simeq 0,082,$$

$g_0$  — это фактор Ланде для электрона в вакууме,  $g^*$  — фактор Ланде в GaAs,  $m^*$  — эффективная масса,  $m_0$  — масса свободного электрона.

$$\hat{G}_3 = i \frac{2m^* \gamma_c R}{\hbar^4} (\sigma_y p_y - \sigma_x p_x) \hat{p}_z + i \frac{m^* \gamma_c R}{\hbar^4} \sigma_z (p_x^2 - p_y^2).$$

Вклады  $\hat{G}_1$ ,  $\hat{G}_2$  были ранее получены в работах [4], [6] соответственно. Вклад  $\hat{G}_3$  получен впервые.

Считая длину  $R$  малой по сравнению с остальными длинами задачи, преобразуем граничное условие (6) к более удобному виду  $\hat{\Gamma}\varphi|_{z=0} = 0$  с оператором  $\hat{\Gamma}$ , который, с учетом спиновых членов до  $R^2 p_i p_j$  ( $i = x, y; j = z$ ) включительно, примет вид

$$\hat{\Gamma} \simeq 1 + i \left( \frac{R\hat{p}_z}{\hbar} + \frac{2m^* \gamma_c R}{\hbar^4} (\sigma_y p_y - \sigma_x p_x) \hat{p}_z + \frac{m^* \gamma_c R}{\hbar^4} \sigma_z (p_x^2 - p_y^2) + \frac{\chi R^2}{\hbar^2} (\sigma_x p_y - \sigma_y p_x) \hat{p}_z \right). \quad (7)$$

### 3. Вклад поверхности в эффективный двумерный гамильтониан для огибающих волновой функции

Вместо того, чтобы решать задачу с известным гамильтонианом (1) и сложным граничным условием (7), перейдем с помощью унитарного преобразования  $\psi = \hat{\Gamma}\varphi$  к новой задаче с преобразованным гамильтонианом и стандартным (нулевым) граничным условием:

$$\hat{H}'\psi = E\psi,$$

$$\psi|_{z=0} = 0.$$

Преобразованный гамильтониан будет определяться выражением

$$\hat{H}' = \hat{H} + \delta\hat{H},$$

$$\delta\hat{H} = R\partial_z V + \frac{\chi R^2}{\hbar} (\sigma_x p_y - \sigma_y p_x) \partial_z V + \frac{2m^* \gamma_c R}{\hbar^3} (\sigma_y p_y - \sigma_x p_x) \partial_z V.$$

После усреднения по быстрому движению электрона вдоль оси размерного квантования получим эффективный двумерный гамильтониан, содержащий все спиновые вклады, общий вид которых известен [7]:

$$\hat{H}_{2D} = \frac{p_x^2}{2m^*} + \frac{p_y^2}{2m^*} + eFR + \alpha_D (\sigma_y p_y - \sigma_x p_x) + \alpha_R (\sigma_x p_y - \sigma_y p_x), \quad (8)$$

$$\alpha_D = \frac{2m^* \gamma_c}{\hbar^3} \left( \frac{(\hat{p}_z^2)_{nn}}{2m^*} + eFR \right), \quad (9)$$

$$\alpha_R = eF \left( a_R + \frac{\chi R^2}{\hbar} \right). \quad (10)$$

Здесь  $\alpha_D$  и  $\alpha_R$  — двумерные константы Дрессельхауза и Рашбы, оси  $x$ ,  $y$  направлены по кубическим осям [100], [010],  $A_{nn} = \langle n | \hat{A} | n \rangle$  — усреднение по  $n$ -му уровню энергии в треугольной яме,  $F = (\partial_z V)_{nn}/e$  — напряженность поля.

Из (9) и (10) видно, что обе константы имеют дополнительный вклад, связанный с влиянием поверхности и существенно зависящий от параметра границы  $R$ . Этот результат ранее не был известен.

#### 4. Влияние магнитного поля: вычисление поправок к компонентам тензора $g$ -фактора двумерных электронов

В магнитном поле оператор импульса следует заменить оператором обобщенного импульса [8]:

$$\hat{\mathbf{p}} \rightarrow \hat{\boldsymbol{\pi}} = \hat{\mathbf{p}} - \frac{q}{c} \mathbf{A},$$

где  $\mathbf{A}$  — вектор-потенциал. Магнитное поле выражается через вектор-потенциал

$$\mathbf{B} = (B_x, B_y, B_z) = \text{rot} \mathbf{A}.$$

Некоммутирующие элементы должны быть заменены на симметризованные комбинации

$$\hat{\pi}_i \hat{\pi}_j \rightarrow \frac{\hat{\pi}_i \hat{\pi}_j + \hat{\pi}_j \hat{\pi}_i}{2} = \{\hat{\pi}_i, \hat{\pi}_j\}.$$

Тогда гамильтониан (1) – (3) и граничное условие (7) примут вид

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hat{\pi}^2}{2m^*} + V(z) + \hat{H}_D + \hat{H}_R - \frac{1}{2} g^* \mu_B (\boldsymbol{\sigma} \mathbf{B}), \\ \hat{H}_D &= \frac{\gamma_c}{\hbar^3} \{ \sigma_x \hat{\pi}_x, (\hat{\pi}_y^2 - \hat{\pi}_z^2) \} + \{ \sigma_y \hat{\pi}_y, (\hat{\pi}_z^2 - \hat{\pi}_x^2) \} + \{ \sigma_z \hat{\pi}_z, (\hat{\pi}_x^2 - \hat{\pi}_y^2) \}, \\ \hat{H}_R &= a_R (\sigma_x \pi_y - \sigma_y \pi_x) \partial_z V(z), \\ \hat{\Gamma} &= \sigma_0 + i \left( \frac{R \hat{\pi}_z}{\hbar} + \frac{2m^* \gamma_c R}{\hbar^4} \{ (\sigma_y \hat{\pi}_y - \sigma_x \hat{\pi}_x), \hat{\pi}_z \} + \frac{m^* \gamma_c R}{\hbar^4} \sigma_z (\hat{\pi}_x^2 - \hat{\pi}_y^2) + \frac{\chi R^2}{\hbar^2} \{ (\sigma_x \hat{\pi}_y - \sigma_y \hat{\pi}_x), \hat{\pi}_z \} \right). \end{aligned}$$

Сделаем преобразование, аналогичное тому, которое было сделано в отсутствие магнитного поля. Сведем задачу к новой — с преобразованным гамильтонианом и нулевым граничным условием:

$$\hat{H}' = \hat{H} + \delta \hat{H},$$

$$\psi|_{z=0} = 0.$$

$$\begin{aligned} \delta \hat{H} &= -\frac{qR}{m^* c} \hat{\pi}_x B_y + \frac{qR}{m^* c} \hat{\pi}_y B_x + R \partial_z V + \frac{2m^* \gamma_c R}{\hbar^3} (\sigma_y \hat{\pi}_y - \sigma_x \hat{\pi}_x) \partial_z V + \\ &+ \frac{\mu_B g^* m^* \gamma_c R}{\hbar^4} (-\sigma_z B_x \{ \pi_y \pi_z \} + \sigma_x B_z \{ \pi_y \pi_z \} - \sigma_z B_y \{ \pi_x \pi_z \} + \sigma_y B_z \{ \pi_x \pi_z \}) + \\ &+ \frac{\mu_B g^* m^* \gamma_c R}{\hbar^4} (\hat{\pi}_x^2 - \hat{\pi}_y^2) (\sigma_y B_x - \sigma_x B_y) + \frac{R^2 \chi}{\hbar} (\sigma_x \hat{\pi}_y - \sigma_y \hat{\pi}_x) \partial_z V - \\ &- \frac{\mu_B g^* R^2 \chi}{\hbar^2} (\sigma_z B_y \{ \pi_y \pi_z \} - \sigma_y B_z \{ \pi_y \pi_z \} + \sigma_z B_x \{ \pi_x \pi_z \} - \sigma_x B_z \{ \pi_x \pi_z \}). \end{aligned} \quad (11)$$

Проведя усреднение по быстрому движению электрона в направлении размерного квантования и по  $N$ -му уровню Ландау (при этом два первых слагаемых в (11) включаются в нулевое приближение), представим полученный вклад в виде зеемановского слагаемого

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \mu_B g_{ij} \sigma_i B_j.$$

Здесь предполагается суммирование по повторяющимся индексам. Отсюда получим компоненты тензора  $g$ -фактора в кубических осях:

$$g_{x'x'} = g_{y'y'} = g^* + \frac{2e^2FR}{c|\mu_B|} \left( a_R + \frac{R^2\chi}{\hbar} \right),$$

$$g_{x'y'} = g_{y'x'} = \frac{2\gamma ce}{|\mu_B|c\hbar^3} ((p_z^2)_{nn}z_{nn} - (p_z^2z)_{nn}) + \frac{4m^*\gamma cRe}{|\mu_B|c\hbar^3} \left( \frac{(p_z^2)_{nn}}{2m^*} + eFR \right) - \frac{2\gamma ce^2}{\hbar^2 c^2 |\mu_B|} R |B_z| \left( N + \frac{1}{2} \right),$$

здесь  $g^* = -0,44$ ,  $N = 0, 1, 2, \dots$  — номер уровня Ландау,  $-e$  — заряд электрона,  $\mu_B$  — магнетон Бора.

Представим  $g$ -фактор в виде

$$g_{ij}(B) = g_{ij}(0) + a_{ijk}B_k. \quad (12)$$

Тогда

$$g_{x'y'}(0) = g_{y'x'}(0) = \frac{2\gamma ce}{|\mu_B|c\hbar^3} ((p_z^2)_{nn}z_{nn} - (p_z^2z)_{nn}) + \frac{4m^*\gamma cRe}{|\mu_B|c\hbar^3} \left( \frac{(p_z^2)_{nn}}{2m^*} + eFR \right), \quad (13)$$

$$a_{x'y'z} = a_{y'x'z} = -\frac{2\gamma ce^2}{\hbar^2 c^2 |\mu_B|} R \left( N + \frac{1}{2} \right). \quad (14)$$

Первое слагаемое в (13) было ранее известно [9]. Второе получено здесь впервые. Оно зависит как от объемной константы Дрессельхауза, так и от константы  $R$ , характеризующей поверхность. Кроме того, получена линейная зависимость недиагональных компонент  $g$ -фактора от квантующей компоненты магнитного поля  $B_z$ . Коэффициент пропорциональности определяется (14). Видно, что он зависит от номера соответствующего уровня Ландау.

В силу равенства недиагональных компонент  $g$ -фактора в кубических осях, при повороте системы координат на  $45^\circ$  вокруг оси  $z$ , тензор станет диагональным, что и наблюдалось в эксперименте [1].

## 5. Сравнение с экспериментом и численные оценки

В работе [2] исследовано спиновое расщепление электронных уровней Ландау в асимметричной квантовой яме с шириной 25 нм и концентрацией электронов  $n_s = 4 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ . Обнаружена сильная анизотропия тензора  $g$ -фактора. Показано, что главными осями тензора являются не кубические оси, а кристаллографические направления [110],  $[-110]$ , [001]. Определены компоненты  $g$ -фактора и его производные по квантующему полю  $B_z$  в главных осях.

Т а б л и ц а 1

Экспериментальные значения компонент тензора  $g$ -фактора и его производных по магнитному полю в главных осях [2]

$g_{xx}(0)$	-0,289	$a_{xxz}(T^{-1})$	0
$g_{yy}(0)$	-0,359	$a_{yyz}(T^{-1})$	-0,012
$g_{zz}(0)$	-0,410	$a_{zzz}(T^{-1})$	-0,0175

Определим недиагональные компоненты в кубических осях, используя формулу

$$g_{x'y'} = \frac{1}{2}(g_{xx} - g_{yy}).$$

Получим  $g_{x'y'}(0) = 0,035$ ,  $a_{x'y'z} = 0,005T^{-1}$ .

Таким образом, из (13), (14) можно определить  $\gamma_c$  и  $R$ :

$$\begin{aligned}\gamma_c &= 9\text{эВ} \times \text{\AA}^3, \\ R &= -24\text{\AA}.\end{aligned}$$

Проанализируем эти значения. Полученные различными авторами значения  $\gamma_c$  для изучаемых ими структур на основе GaAs лежат в интервале (9–28) эВ  $\times$   $\text{\AA}^3$  [10]. Наше значение попадает в этот интервал.

Отрицательный знак  $R$  соответствует отсутствию поверхностных (таммовских) состояний, что не противоречит эксперименту для гетерограницы GaAs/AlGaAs. Кроме того, численное значение  $R$  обеспечивает выполнение тех предположений, которые были сделаны нами при построении теории.

## 6. Вывод

Мы применили оригинальный метод для описания гетерограницы. Он основывается на том, что приближение эффективной массы неприменимо для описания атомарно резкого потенциала границы. Поэтому ее следует описывать граничным условием, которое получено нами из общих соображений эрмитовости гамильтониана на полупространстве и инвариантности задачи по отношению к обращению времени. Показано, что граничное условие определяется единственным параметром  $R$ , который имеет размерность длины и характеризует границу. Вычисления произведены с учетом отсутствия центра инверсии в объемном кристалле и асимметричности структуры (вклады типа Дрессельхауза и Рашбы).

Получен эффективный двумерный гамильтониан. Показано, что двумерные константы Дрессельхауза и Рашбы содержат дополнительные вклады, связанные с влиянием поверхности и зависящие от  $R$ .

Изучено влияние магнитного поля на спектр двумерных электронов. Получены значения компонент тензора  $g$ -фактора электрона. Показано, что сочетание влияния поверхности, отсутствия у кристалла центра инверсии и спин-орбитального взаимодействия приводит к линейности  $g$ -фактора по квантующей компоненте магнитного поля  $B_z$ . Коэффициент пропорциональности существенно зависит от параметра границы  $R$ , константы Дрессельхауза  $\gamma_c$  и номера соответствующего уровня Ландау. Из сравнения полученных выражений (13) и (14) с экспериментальными значениями [2] определены  $\gamma_c = 9$  эВ  $\times$   $\text{\AA}^3$  и  $R = -24$   $\text{\AA}$ . Показано, что они являются физически разумными.

---

Работа поддержана грантом РФФИ 14-02-011-66.

Ж. А. Девизорова выражает благодарность фонду «Династия».

## Литература

1. Roth L.M.  $g$ -factor and donor spin-lattice relaxation for electrons in germanium and silicon // Phys. Rev. — 1960. — V. 118, N 6. — P. 1534–1540.
2. Nefyodov Yu.A., Shchepetilnikov A.V., Kukushkin I.V., Dietsche W., Schmult S.  $g$ -factor anisotropy in GaAs / Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As quantum well probed by electron spin resonance // Phys. Rev. B. — 2011. — V. 83. — P. 041307-1–041307-4.
3. Zawadzki W., Pfeffer P. Spin splitting of subband energies due to inversion asymmetry in semiconductor heterostructure // Semicond. Sci. Technol. — 2004. — V. 19. — P. R1–R17.
4. Volkov V.A., Pinsker T.N. Boundary conditions, energy spectrum, and optical transitions of electrons in bounded narrow gap crystals // Surface Science. — 1979. — V. 81. — P. 181–192.
5. Bychkov Yu.A., Rashba E.I. Oscillatory effects and the magnetic susceptibility of carriers in inversion layers // J. Phys. C: Solid State Phys. — 1984. — V. 17. — P. 6039–6045.

6. *Васько Ф. Т.* Спиновое расщепление спектра двумерных электронов, обусловленное поверхностным потенциалом // Письма в ЖЭТФ. — 1979. — Т. 30, вып. 9. — С. 574–577.
7. *Winkler R.* Spin-orbit coupling effects in two dimensional electron and hole systems // Springer Tracts in Modern Physics. — 2003. — V. 191. — P. 201–205.
8. *Luttinger G. M., Kohn W.* Motion of electrons and holes in perturbed periodic field // Phys. Rev. — 1955. — V. 97, N 4. — P. 869–883.
9. *Калевич В. К., Корнев В. Л.* Анизотропия электронного  $g$ -фактора в асимметричной квантовой яме GaAs/AlGaAs // Письма в ЖЭТФ. — 1993. — Т. 57, вып. 9. — С. 557–560.
10. *Fabian J., Matos-Abiaduea A., Ertler C., Stano P., Zutic I.* Semiconductor spintronics // Acta physica slovacica. — 2007. — V. 57, N 4. — P. 693.

Поступила в редакцию 15.12.2012.