

АНИЗОТРОПИЯ ЭЛЕКТРОННОГО g -ФАКТОРА В ПОЛУПРОВОДНИКАХ КУБИЧЕСКОЙ СИММЕТРИИ

П. С. Алексеев*

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

Поступила в редакцию 11 апреля 2008 г.

Изучены спин-орбитальные поправки к электронным состояниям в объемных кубических полупроводниках без центра инверсии в ультраквантовом магнитном поле. Показано, что за счет спин-орбитального взаимодействия происходят сдвиг уровней Ландау и появление в выражении для g -фактора электрона дополнительных слагаемых. Поправки к g -фактору приводят к отклонению макроскопической намагниченности от направления магнитного поля, к зависимости частоты спинового резонанса от ориентации магнитного поля относительно главных осей кристалла, а также к анизотропии спиновой релаксации по механизму Дьяконова – Переля.

PACS: 71.70.Di, 71.18.+y, 75.30.Gw

1. ВВЕДЕНИЕ И ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Особенности зонной структуры полупроводника могут оказывать значительное влияние на квантование движения электронов проводимости в магнитном поле. Экспериментально это может быть обнаружено при наблюдении осцилляций Шубникова – де Гааза [1–3], в циклотронном и спиновом резонансах [4–6], в особенностях спиновой релаксации в магнитном поле [7]. В ряде теоретических работ было изучено влияние спин-орбитального взаимодействия на состояния двумерных электронов в магнитных полях произвольной величины и ориентации [8–10]. Задачей, решаемой в настоящей работе, является исследование поправок за счет спин-орбитального взаимодействия к электронным состояниям в магнитном поле в объемных полупроводниках со структурой цинковой обманки. Очевидно, что поправки могут носить существенно различный характер для различных величин магнитного поля. Ниже в этом разделе устанавливаются интервалы магнитных полей, которые необходимо различать при рассмотрении спин-орбитальных поправок, и на основе этого уточняется постановка задачи.

В кубических полупроводниках без центра инверсии с кристаллической решеткой цинковой обманки

за снятие спинового вырождения зоны проводимости отвечает кубический по волновому вектору член Дрессельхауза

$$\hat{H}_D(\mathbf{k}) = \gamma \{ k_x(k_y^2 - k_z^2)\hat{\sigma}_x + k_y(k_z^2 - k_x^2)\hat{\sigma}_y + k_z(k_x^2 - k_y^2)\hat{\sigma}_z \}, \quad (1)$$

где γ — константа спин-орбитального взаимодействия в данном материале, или константа Дрессельхауза, $\hat{\sigma}$ — матрицы Паули, координатные оси x , y и z направлены соответственно вдоль кристаллографических осей [100], [010] и [001]. Рассмотрим вырожденный электронный газ с энергией Ферми $E_F \approx \hbar^2 k_F^2 / 2m^*$, где m^* — эффективная масса электрона. Наличие магнитного поля приводит к тому, что в эффективном гамильтониане

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} + \hat{H}_D(\mathbf{k}),$$

волновой вектор \mathbf{k} заменяется на оператор $\hat{\mathbf{K}} = \hat{\mathbf{k}} + e\mathbf{A}/c\hbar$, где $\hat{\mathbf{k}} = -i\partial/\partial\mathbf{r}$, \mathbf{A} — векторный потенциал магнитного поля \mathcal{H} [11]. Кроме того, к \hat{H} добавляется зеемановский член $\hat{H}_Z = g\mu_B(\hat{\sigma} \cdot \mathcal{H})/2$, где g — g -фактор электрона проводимости в данном материале. При этом возникает следующая проблема. Компоненты \hat{K}_i обобщенного импульса не коммутируют, и поэтому при их подстановке в гамильтониан

*E-mail: alekseev_p_s@mail.ru

(1) не ясен заранее порядок их взаимного расположения в произведениях. Этот вопрос был рассмотрен в работе [12]. Был установлен порядок следования операторов \hat{K}_i в члене \hat{H}_D . Также было показано, что в случае однородного магнитного поля в рамках третьего порядка \mathbf{k} -теории возмущений новых членов, кроме $\hbar^2 \hat{K}^2/2m^*$, \hat{H}_D и \hat{H}_Z , в эффективном гамильтониане электрона не появляется. Таким образом, спин-орбитальные поправки определяются единственной константой γ (окончательный вид гамильтониана задачи приведен в разд. 2).

Характер квантования движения электрона существенно зависит от величины магнитного поля. Различаются случаи слабых и сильных магнитных полей, переходу между которыми соответствует условие $E_F \sim \hbar\omega_c$, где $\omega_c = e\mathcal{H}/m^*c$ — циклотронная частота. В случае слабых магнитных полей заселено большое число уровней Ландау и характерные величины основного (квадратичного) и спин-орбитального членов в гамильтониане \hat{H} равны соответственно E_F и γk_F^3 . В случае сильных полей электроны распределены на нескольких первых уровнях Ландау. Квадратичный и спин-орбитальный вклады в эффективном гамильтониане оцениваются величинами $\hbar\omega_c$ и γ/l_m^3 , где $l_m = \sqrt{c\hbar/e\mathcal{H}}$ — магнитная длина. При всех магнитных полях величина зеемановского члена составляет $\hbar\omega_L/2$, где $\omega_L = |g|m^*\omega_c/2m_0$ — ларморовская частота, m_0 — масса свободного электрона.

Случай слабых магнитных полей, $\hbar\omega_c \ll E_F$, является квазиклассическим. За спиновые поправки к электронным состояниям отвечает преимущественно либо член Дрессельхауза (если $\hbar\omega_L < \gamma k_F^3$), либо зеемановский член (если $\hbar\omega_L > \gamma k_F^3$). Исследование спин-орбитальных поправок для этого интервала полей было проведено в работах [1, 2]. Основным интерес представляли квазиклассические уровни Ландау с большими номерами, для которых некоммутативность компонент \hat{K}_i обобщенного импульса в гамильтониане (1) являлась несущественной.

При магнитных полях $\hbar\omega_c \sim E_F$ основную роль играет квантование Ландау за счет квадратичного члена в гамильтониане \hat{H} . Существенно изменяется плотность электронных состояний по сравнению со случаем отсутствия магнитного поля, энергия Ферми $E_F(\mathcal{H})$ значительно отличается от своего значения $E_F(0)$ в отсутствие магнитного поля. Спиновое расщепление определяется в основном зеемановским членом (при условии $\hbar\omega_L > \gamma/l_m^3$, которое обычно справедливо вплоть до весьма сильных магнитных полей). Спин-орбитальное взаимодействие приводит к поправкам к g -фактору элек-

тронов на каждом уровне Ландау. Соответствующее рассмотрение было выполнено в работе [7]. Были вычислены поправки к g -фактору первого порядка по спин-орбитальному взаимодействию. Полученные поправки линейно зависели от волнового вектора электрона в направлении магнитного поля и обращались в нуль, когда магнитное поле было направлено вдоль главных кристаллографических осей $\langle 111 \rangle$ и $\langle 001 \rangle$.

В очень сильных магнитных полях, $\hbar\omega_c \gg E_F$, заселен только основной уровень Ландау. Такие магнитные поля называются ультраквантовыми. Уровню Ферми $E_F(\mathcal{H})$ можно по аналогии со случаем отсутствия магнитного поля поставить в соответствие волновой вектор Ферми вдоль направления магнитного поля, $k_F^{uq} = k_F^{uq}(\mathcal{H})$:

$$\frac{\hbar^2 (k_F^{uq})^2}{2m^*} \approx E_F(\mathcal{H}) - \frac{\hbar\omega_c}{2}$$

($E_F(\mathcal{H})$ отсчитывается от дна зоны проводимости в отсутствие магнитного поля). Нетрудно показать, что $k_F^{uq} = k_F^3 l_m^2/3$, откуда $k_F^{uq} \ll 1/l_m$. Поэтому спин-орбитальные поправки первого порядка, линейные по волновому вектору, могут подавляться поправками более высоких порядков, в которые волновой вектор, возможно, не входит. Если кроме того $\hbar\omega_L < \gamma/l_m^3$, то спин-орбитальный член начинает оказывать даже преимущественное влияние на спиновую часть электронных состояний на основном уровне Ландау.

Верхней границей случая ультраквантовых полей является нарушение условий применимости метода эффективной массы. Это заведомо происходит при условии $\hbar\omega_c \sim \gamma/l_m^3$, означая, что в эффективном гамильтониане \hat{H} для характерных электронов \mathbf{k} -члены третьего порядка сравнялись с \mathbf{k} -членами второго порядка. Классификация электронных состояний становится принципиально отличной от квазиблоховских волн метода эффективной массы. В работе [13] было показано, что в этом случае спектр электрона существенным образом зависит от величины потока магнитного поля через элементарную ячейку кристалла и обладает фрактальной структурой (бабочка Хофштадтера).

В данной работе изучаются спин-орбитальные поправки к электронным состояниям в ультраквантовых магнитных полях. Большое внимание уделяется эффектам анизотропии поправок при изменении направления магнитного поля относительно главных осей кристалла. В работе также рассматриваются спин-орбитальные поправки к спектру электронов, когда магнитное поле (не обязательно ульт-

траквантовое) направлено вдоль главных кристаллографических осей. Этот случай не был изучен ранее и представляет интерес в связи с задачами о туннельном и холловском транспорте в гетероструктурах.

2. ГАМИЛЬТониАН

Гамильтониан электрона в кубическом полупроводнике без центра инверсии с учетом спин-орбитального взаимодействия при наличии однородного магнитного поля имеет вид [12]

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2 \hat{K}^2}{2m^*} + \hat{H}_Z + \hat{H}_{SO}(\hat{\mathbf{K}}), \quad (2)$$

где

$$\begin{aligned} \hat{H}_{SO}(\hat{\mathbf{K}}) &= \gamma(\hat{\kappa}(\hat{\mathbf{K}}) \cdot \hat{\sigma}), \\ \hat{\kappa}_x(\hat{\mathbf{K}}) &= \hat{K}_y \hat{K}_x \hat{K}_y - \hat{K}_z \hat{K}_x \hat{K}_z, \\ \hat{\kappa}_y(\hat{\mathbf{K}}) &= \hat{K}_z \hat{K}_y \hat{K}_z - \hat{K}_x \hat{K}_y \hat{K}_x, \\ \hat{\kappa}_z(\hat{\mathbf{K}}) &= \hat{K}_x \hat{K}_z \hat{K}_x - \hat{K}_y \hat{K}_z \hat{K}_y. \end{aligned}$$

Выражение (2) содержит в себе все члены до третьего порядка **kp**-теории возмущений (общая схема построения **kp**-гамильтониана во всех порядках теории возмущений при наличии магнитного поля была впервые разработана Коном [14]).

Рассмотрим объемный полупроводник, к которому приложено однородное магнитное поле в произвольном направлении относительно главных кристаллографических осей. Введем вспомогательную

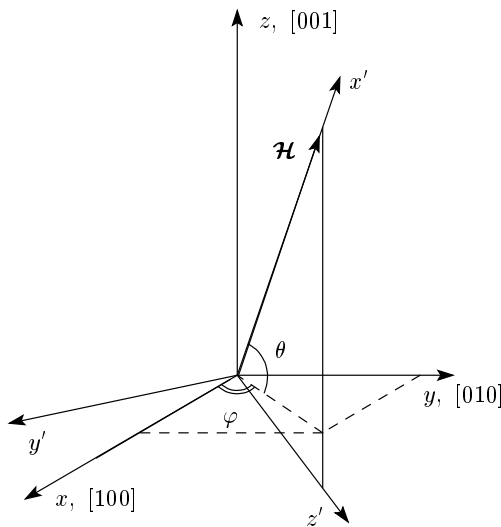


Рис. 1. «Кристаллическая» и «магнитная» системы координат

«магнитную» систему координат следующим образом. Пусть ось x' совпадает с направлением магнитного поля \mathcal{H} , ось z' лежит в плоскости векторов \mathbf{e}_z и $\mathbf{e}_{x'}$ и образует с вектором \mathbf{e}_z тупой угол, а ось y' выбрана так, чтобы орты $\mathbf{e}_{x'}$, $\mathbf{e}_{y'}$ и $\mathbf{e}_{z'}$ составляли правую тройку (рис. 1). Обозначим через θ и φ полярные углы вектора \mathcal{H} в исходной системе координат xyz . Угол θ ($-\pi/2 \leq \theta \leq \pi/2$) отсчитывается от плоскости xy . Старые, «кристаллические», координаты волнового вектора \mathbf{k} выражаются через новые, «магнитные», следующим образом:

$$\begin{aligned} k_x(k_{x'}, k_{y'}, k_{z'}) &= \cos \theta \cos \varphi k_{x'} + \sin \varphi k_{y'} + \sin \theta \cos \varphi k_{z'}, \\ k_y(k_{x'}, k_{y'}, k_{z'}) &= \cos \theta \sin \varphi k_{x'} - \cos \varphi k_{y'} + \sin \theta \sin \varphi k_{z'}, \\ k_z(k_{x'}, k_{y'}, k_{z'}) &= \sin \theta k_{x'} - \cos \theta k_{z'}. \end{aligned}$$

Выберем векторный потенциал в стандартной калибровке Ландау: $\mathbf{A} = -\mathcal{H}z'\mathbf{e}_{y'}$. Компоненты $k_{x'}$ и $k_{y'}$ волнового вектора остаются хорошими квантовыми числами, и волновая функция электрона записывается в виде

$$\psi_{k_{x'}, k_{y'}} = \exp[i(k_{x'}x' + k_{y'}y')] \chi_{k_{x'}, k_{y'}}(z').$$

Спинор $\chi_{k_{x'}, k_{y'}}(z')$, вообще говоря, нельзя представить в виде $u_{k_{x'}, k_{y'}}(z') \chi_{k_{x'}, k_{y'}}(z')$, где $u_{k_{x'}, k_{y'}}(z')$ — скалярная функция. Это означает, что в данной задаче спиновые и пространственные переменные не разделяются.

После введения безразмерной осцилляторной переменной $\xi = z'/l_m - k_{y'}l_m$ уравнение Шредингера для спинора $\chi_{k_{x'}, k_{y'}}(z')$ принимает вид

$$\hat{H}^\xi \chi_{k_{x'}, k_{y'}} = E^\xi \chi_{k_{x'}, k_{y'}}, \quad (3)$$

где

$$\hat{H}^\xi = \frac{\hbar\omega_c}{2} \left(-\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2 \right) + \hat{H}_Z + \hat{H}_{SO}^\xi, \quad (4)$$

E^ξ — претерпевающая квантование часть полной энергии электрона,

$$E = E^\xi + \frac{\hbar^2 k_{x'}^2}{2m^*},$$

$\hat{H}_{SO}^\xi = \hat{H}_{SO}^\xi(k_{x'})$ — член спин-орбитального взаимодействия, выраженный через осцилляторную переменную ξ ,

$$\hat{H}_{SO}^\xi = \frac{\gamma}{l_m^3} (\hat{\kappa}^\xi \cdot \hat{\sigma}), \quad (5)$$

$\hat{\kappa}_i^\xi$ — многочлены третьей степени от операторов ξ и $d/d\xi$, зависящие от волнового вектора $k = k_x l_m$ и определяемые следующим образом:

$$\hat{\kappa}^\xi = \hat{\kappa}(\hat{\mathbf{K}}^\xi),$$

$$\hat{\mathbf{K}}^\xi = \begin{pmatrix} k_x(k, -\xi, -id/d\xi) \\ k_y(k, -\xi, -id/d\xi) \\ k_z(k, -\xi, -id/d\xi) \end{pmatrix}.$$

Гамильтониан (4) не зависит явным образом от квантового числа $k_{y'}$, поэтому вырождение по нему сохраняется как и в случае квантования без учета спин-орбитального взаимодействия. Таким образом, результат решения уравнения (3) представляет собой набор расщепленных по спину дискретных уровней $E_{n,s;k}$ (уровней Ландау, модифицированных спин-орбитальным взаимодействием) и набор соответствующих им спинорных волновых функций $\chi_{n,s;k}(z')$. Как обычно, квантовые числа $n = 0, 1, 2, \dots$ и $s = +, -$.

Зеемановский член \hat{H}_Z с учетом введенных углов θ и φ имеет следующий вид:

$$\hat{H}_Z = \frac{g\mu_B \mathcal{H}}{2} (c_\theta c_\varphi \hat{\sigma}_x + c_\theta s_\varphi \hat{\sigma}_y + s_\theta \hat{\sigma}_z).$$

Здесь и далее в этом разделе используются следующие сокращенные обозначения:

$$c_\theta = \cos \theta, \quad s_\theta = \sin \theta,$$

$$c_\varphi = \cos \varphi, \quad s_\varphi = \sin \varphi.$$

Спин-орбитальное слагаемое \hat{H}_{SO}^ξ в гамильтониане (4) в явном виде было вычислено для трех частных случаев. Во-первых, в качестве проверки был рассмотрен ранее исследованный в работе [7] случай квантовых, но не слишком сильных магнитных полей, когда $\hbar\omega_c \sim E_F$. Для изучения поправок первого порядка к n -му бесспиновому уровню Ландау за счет зеемановского и спин-орбитального членов необходимо усреднить гамильтониан (4) по координатной волновой функции n -го бесспинового уровня Ландау $|n\rangle$:

$$\hat{H}_n^{(1)} = \langle n | \hat{H}^\xi | n \rangle,$$

и решить полученное секулярное уравнение

$$\hat{H}_n^{(1)} \chi_{n;k} = E^\xi \chi_{n;k}.$$

Всюду в настоящей работе верхний индекс в круглых скобках у оператора означает, что этот оператор действует в подпространстве спиновых переменных размерности 2, в силу чего является матрицей

2×2 . При вычислении диагонального матричного элемента $\langle n | \hat{\kappa}^\xi | n \rangle$ не исчезают только четные по ξ операторы $\hat{1}$, ξ^2 и $d^2/d\xi^2$, и спин-орбитальное слагаемое $\hat{H}_{n,SO}^{(1)}$ одноуровневого гамильтониана

$$\hat{H}_n^{(1)} = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c + \hat{H}_Z + \hat{H}_{n,SO}^{(1)}$$

имеет вид

$$\hat{H}_{n,SO}^{(1)} = \frac{\gamma}{l_m^3} \left[k^3 + 3k \left(n + \frac{1}{2} \right) \right] \times$$

$$\times [c_\theta c_\varphi (s_\theta^2 - c_\theta^2 s_\varphi^2) \hat{\sigma}_x + c_\theta s_\varphi (c_\theta^2 c_\varphi^2 - s_\theta^2) \hat{\sigma}_y +$$

$$+ s_\theta c_\theta^2 (s_\varphi^2 - c_\varphi^2) \hat{\sigma}_z]. \quad (6)$$

Этот результат совпал с полученным ранее в работе [7].

Во-вторых, был рассмотрен вырожденный случай, когда магнитное поле направлено вдоль кристаллографической оси [100]: при этом спин-орбитальные поправки (6) к уровням Ландау первого приближения исчезают. При выбранном способе задания магнитных координат оказывается, что $\mathbf{e}_{x'} = \mathbf{e}_x$, $\mathbf{e}_{y'} = -\mathbf{e}_y$ и $\mathbf{e}_{z'} = -\mathbf{e}_z$. Вычисление гамильтониана спин-орбитального взаимодействия \hat{H}_{SO}^ξ по формуле (5) дает

$$\hat{H}_{SO}^\xi = \frac{\gamma}{l_m^3} \left[k \left(\xi^2 + \frac{d^2}{d\xi^2} \right) \hat{\sigma}_x + \right.$$

$$\left. + \left(-k^2 \xi - \frac{d}{d\xi} \xi \frac{d}{d\xi} \right) \hat{\sigma}_y + i \left(k^2 \frac{d}{d\xi} - \xi \frac{d}{d\xi} \xi \right) \hat{\sigma}_z \right]. \quad (7)$$

Выражение (7) выведено без каких-либо предположений относительно соотношения между величинами $k_{x'}$ и $1/l_m$, что дает возможность рассматривать в этой геометрии спиновые поправки при магнитных полях произвольной величины.

В-третьих, был рассмотрен случай ультраквантовых магнитных полей произвольного направления относительно главных осей кристалла. В этой ситуации $k \leq k_F^u l_m \ll 1$ (см. разд. 1). Следовательно, с ростом магнитного поля гамильтониан первого порядка (6) становится мал по сравнению с величиной γ/l_m^3 , представляющей собой оценку спин-орбитального члена в квантовом случае. Поэтому необходимо учитывать поправки второго порядка по спин-орбитальному взаимодействию и для этого провести вычисление всех членов в гамильтониане \hat{H}_{SO}^ξ по формуле (5). При этом следует считать, что $k = 0$, так как переменная ξ безразмерна и характерные величины всех зависящих от ξ операторов для основного уровня Ландау по порядку

величины равны единице. С учетом последнего предположения для операторов $\hat{\kappa}_i^\xi$ было получено

$$\begin{aligned} \hat{\kappa}_x^\xi &= is_\theta c_\varphi (s_\theta^2 s_\varphi^2 - c_\theta^2) \frac{d^3}{d\xi^3} - s_\varphi c_\varphi^2 \xi^3 + \\ &+ s_\varphi (-3s_\theta^2 c_\varphi^2 + s_\theta^2 - c_\theta^2) \frac{d}{d\xi} \xi \frac{d}{d\xi} + \\ &+ is_\theta c_\varphi (2s_\varphi^2 - c_\varphi^2) \xi \frac{d}{d\xi} \xi, \\ \hat{\kappa}_y^\xi &= -is_\theta s_\varphi (s_\theta^2 c_\varphi^2 - c_\theta^2) \frac{d^3}{d\xi^3} - s_\varphi^2 c_\varphi \xi^3 + \\ &+ c_\varphi (-3s_\theta^2 s_\varphi^2 + s_\theta^2 - c_\theta^2) \frac{d}{d\xi} \xi \frac{d}{d\xi} - \\ &- is_\theta s_\varphi (2c_\varphi^2 - s_\varphi^2) \xi \frac{d}{d\xi} \xi, \\ \hat{\kappa}_z^\xi &= is_\theta^2 c_\theta (-c_\varphi^2 + s_\varphi^2) \frac{d^3}{d\xi^3} - \\ &- 4s_\theta c_\theta s_\varphi c_\varphi \frac{d}{d\xi} \xi \frac{d}{d\xi} + ic_\theta (s_\varphi^2 - c_\varphi^2) \xi \frac{d}{d\xi} \xi. \end{aligned} \quad (8)$$

3. ПОПРАВКИ К g -ФАКТОРУ

Исследуем поправки к электронным состояниям, вызванные спин-орбитальным взаимодействием (7) и (8). Из изложенного в разд. 2 следует, что если магнитное поле направлено вдоль кристаллографической оси [100] или настолько велико, что $\hbar\omega_c \gg E_F$, то в первом порядке теории возмущений спин-орбитальные поправки к основному уровню Ландау исчезают. В «одноуровневом» гамильтониане $\hat{H}_0^{(1)}$ из спин-зависимых слагаемых остается только зеемановский член:

$$\hat{H}_0^{(1)} = \frac{\hbar\omega_c}{2} + \hat{H}_Z.$$

Следуя [15], вычислим «одноуровневый» гамильтониан $\hat{H}_0^{(2)} = \hat{H}_0^{(1)} + \hat{H}_{0,SO}^{(2)}$ основного бесспинового уровня Ландау, учитывающий взаимодействие с остальными уровнями Ландау во втором порядке теории возмущений. Общее выражение для члена $\hat{H}_{0,SO}^{(2)}$ в гамильтониане $\hat{H}_0^{(2)}$ имеет вид

$$\hat{H}_{0,SO}^{(2)} = \sum_{m \neq 0} \frac{\hat{H}'_{0m} \hat{H}'_{m0}}{E_0^{(0)} - E_m^{(0)}}, \quad (9)$$

где m — номер уровня Ландау, $E_m^{(0)}$ — уровни Ландау без учета спина, $\hat{H}'_{mn} = \langle m | \hat{H}_{SO}^\xi | n \rangle$.

По порядку величины гамильтониан (9) равен $(\gamma/l_m^3)^2/\hbar\omega_c$, т. е. он становится сравним с зеемановским членом $\hat{H}_Z \sim gm^* \hbar\omega_c/4m_0$ при магнитных полях, удовлетворяющих условию

$$\hbar\omega_L \sqrt{\frac{4m_0}{gm^*}} \sim \frac{\gamma}{l_m^3}. \quad (10)$$

Это соотношение уточняет приведенное в разд. 1 пограничное соотношение $\hbar\omega_L \sim \gamma/l_m^3$ между интервалами магнитных полей, на каждом из которых доминирует член \hat{H}_Z или \hat{H}_{SO} . Особенно велика роль члена (9) по сравнению с зеемановским может быть, когда g -фактор рассматриваемого полупроводника близок к нулю. При этом возможна даже такая ситуация, что при всех полях $\hbar\omega_c \gtrsim E_F$ за спиновые поправки будет отвечать преимущественно член спин-орбитального взаимодействия.

В процессе нахождения $\hat{H}_{0,SO}^{(2)}$ возникает необходимость вычислять матричные элементы операторов $\hat{\kappa}_i^\xi$ между волновыми функциями $|0\rangle$ и $|m\rangle$. В силу кубичности $\hat{\kappa}_i^\xi$ по операторам ξ и $d/d\xi$ ряд в формуле (9) обрывается на третьем члене. Не приводя остальных подробностей промежуточных вычислений, сразу изложим результаты.

В случае магнитного поля, направленного вдоль оси [100], на основе формулы (7) для гамильтониана $\hat{H}_{0,SO}^{(2)}$ получается выражение

$$\hat{H}_{0,SO}^{(2)} = \delta(\mathcal{H}) \left[-\frac{3}{4} - k^4 + \hat{\sigma}_x \left(-\frac{1}{4} - k^2 + k^4 \right) \right], \quad (11)$$

где

$$\delta(\mathcal{H}) = \frac{(\gamma/l_m^3)^2}{\hbar\omega_c} = \frac{m^* e^2 \gamma^2 \mathcal{H}^2}{c^2 \hbar^4}.$$

Выражение (11) означает, что спин-орбитальное взаимодействие приводит к зависящим от волнового вектора k сдвигу основного бесспинового уровня Ландау и поправке к g -фактору для электронов на этом уровне:

$$E_{0,\pm;k} = \frac{1}{2} \hbar\omega_c + \Delta E \pm \frac{1}{2} g' \mu_B \mathcal{H},$$

где

$$\Delta E(\mathcal{H}) = \delta(\mathcal{H}) \left(-\frac{3}{4} - k^4 \right), \quad (12)$$

$$g'(\mathcal{H}) = g + \frac{em_0 m^* \gamma^2 \mathcal{H}}{c \hbar^5} (-1 - 4k^2 + 4k^4).$$

Этот результат справедлив для магнитных полей произвольной величины, так что учет членов k^2 и k^4 в выражениях (11) и (12) является существенным.

По полученным формулам (12) был проведен численный расчет спиновых поправок к энергии $\delta E_\pm = \Delta E \pm g' \mu_B \mathcal{H}/2$ для твердого раствора $\text{Al}_{0.12}\text{Ga}_{0.88}\text{As}$, где величина g -фактора близка к нулю. Для эффективной массы электрона в $\text{Al}_{0.12}\text{Ga}_{0.88}\text{As}$ на основе линейной интерполяции

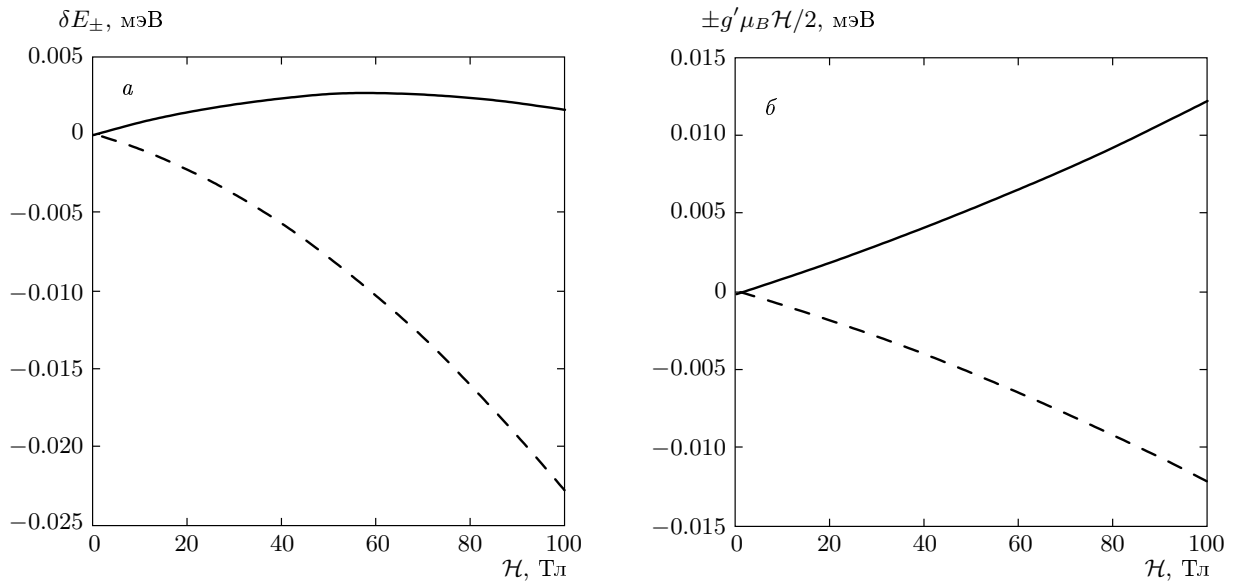


Рис. 2. Спиновые поправки $\delta E_{\pm}(\mathcal{H})$ к энергии основного уровня Ландау $\hbar\omega_c/2$ (а) и спиновое расщепление $\pm g'(\mathcal{H})\mu_B \mathcal{H}/2$ основного уровня Ландау (б) как функции магнитного поля $\mathcal{H}||[100]$ при $k_{x'} = 0$. Расчет выполнен для твердого раствора $\text{Al}_{0.12}\text{Ga}_{0.88}\text{As}$, использовались следующие значения зонных параметров: $m^* = 0.075m_0$, $\gamma = 24.5 \text{ эВ}\cdot\text{\AA}^3$, $g = -0.003$

между значениями масс для GaAs и $\text{Al}_{0.3}\text{Ga}_{0.7}\text{As}$ было получено значение $m^* = 0.075m_0$. Для константы Дрессельхауза использовалось ее значение в GaAs $\gamma = 24.5 \text{ эВ}\cdot\text{\AA}^3$. Величина g -фактора была выбрана равной -0.003 (не выбиралось значение точного нуля, чтобы модельно учесть возможную неопределенность g -фактора в реальном материале). При этом величины магнитных полей, соответствующих переходу от квазиклассического к квантовому случаю (условие $\hbar\omega_c \sim E_F$) и от случая $\hat{H}_Z > \hat{H}_{0,SO}^{(2)}$ к случаю $\hat{H}_Z < \hat{H}_{0,SO}^{(2)}$ (условие (10)), составили соответственно 3.3 и 62.5 Тл при $E_F = 5 \text{ мэВ}$. На рис. 2а приведена зависимость спиновых поправок δE_{\pm} от магнитного поля при $k = 0$. На рис. 2б представлено спиновое расщепление основного уровня Ландау $\pm g'(\mathcal{H})\mu_B \mathcal{H}/2$ как функция магнитного поля при $k = 0$, т.е. зависимость $\delta E_{\pm}(\mathcal{H})$ без учета постоянного сдвига $\Delta E(\mathcal{H})$. Зависимость величин δE_{\pm} от волнового вектора $k_{x'}$ при фиксированном магнитном поле приведена на рис. 3. Нетривиальными особенностями спиновых поправок, как видно из рисунков, являются те факты, что спиновое расщепление есть нелинейная функция магнитного поля, а g -фактор как функция волнового вектора $k_{x'}$ может менять знак.

Случай произвольной ориентации магнитного поля относительно кристаллографических осей был

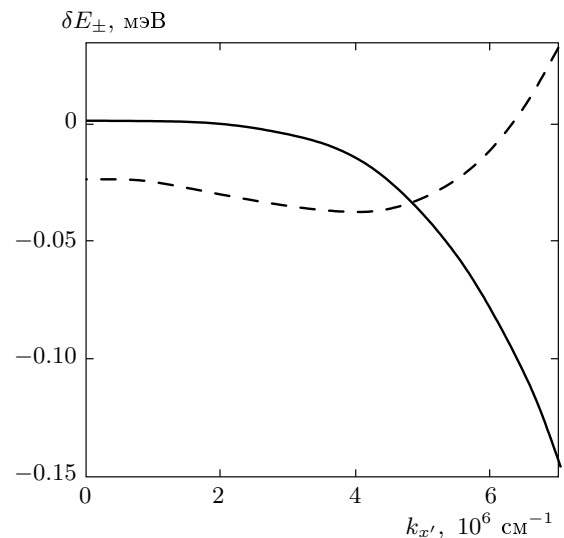


Рис. 3. Спиновые поправки δE_{\pm} к энергии основного уровня Ландау $\hbar\omega_c/2$ в объемном $\text{Al}_{0.12}\text{Ga}_{0.88}\text{As}$ как функции волнового вектора $k_{x'}$ при магнитном поле $\mathcal{H} = 70 \text{ Тл}$, $\mathcal{H} || [100]$

исследован численно. По выражениям (8) был проведен расчет «одноуровневого» гамильтониана $\hat{H}_0^{(2)}$ для основного бесспинового уровня Ландау и спиновых поправок к энергии δE_{\pm} . Критерий подавления

поправок первого порядка (6) поправками второго порядка (8), уточняющий критерий ультраквантовости $\hbar\omega_c \gg E_F$, имеет вид

$$\frac{(\gamma/l_m^3)^2}{\hbar\omega_c} \gtrsim \frac{\gamma}{l_m^3} k_F^{uq} l_m.$$

Это условие может быть переписано следующим образом:

$$l_m \gtrsim \frac{1}{k_F} \sqrt[4]{\frac{\gamma k_F^3}{E_F}},$$

что при $E_F = 5$ мэВ дает $\mathcal{H} \gtrsim 76.4$ Тл для GaAs и $\mathcal{H} \gtrsim 20.5$ Тл для GaSb. Зависимости $\delta E_{\pm}(\mathcal{H})$ при различных значениях углов φ и θ оказались приблизительно такими же, как и в исследованном аналитически случае $\varphi = 0$ и $\theta = 0$ (см. рис. 2).

Кроме того, учет спин-орбитального взаимодействия приводит к различным эффектам анизотропии электронных состояний в ультраквантовом магнитном поле произвольного направления. Примерами таких эффектов являются отклонение направления спина электрона в собственных состояниях от направления магнитного поля, а также анизотропия определяемой по частоте спинового резонанса абсолютной величины g -фактора. Все эти эффекты могут интерпретироваться как возникновение в гамильтониане $\hat{H}_0^{(2)}$ члена вида $g_{ij}(\mathcal{H}) \hat{\sigma}_i \mathcal{H}_j$, т. е. появление в g -факторе электрона анизотропных поправок.

Отклонение направления спина электрона в собственных состояниях $\chi_s \equiv \chi_{0,s;0}$ от направления $\mathbf{e}_{x'}$ магнитного поля связано с тем, что спин-орбитальный член \hat{H}_{SO}^{ξ} в гамильтониане \hat{H}^{ξ} анизотропно зависит от направления магнитного поля (см. формулы (8)). Для изучения этого эффекта были численно найдены собственные спиноры χ_s и соответствующие им электронные спины \mathbf{s}_s . Количественно отклонение спина электрона от направления магнитного поля характеризовалось величиной $\delta s_+ = |\mathbf{s}_+ - \mathbf{e}_{x'}/2|$. Вычисление показало, что при изменении магнитного поля от 0 до 100 Тл величина δs_+ монотонно растет (для разных направлений магнитного поля с разной скоростью) и достигает значительной доли от 1/2. На рис. 4 приведен результат расчета δs_+ как функции полярных углов θ и φ при 100 Тл. Функция $\delta s_+(\theta, \varphi)$ описывает некоторое универсальное свойство кристалла симметрии T_d . Кроме того, она всюду положительна и не меняет знак при инверсии координат. Следовательно, она представляет собой единичное представление A_1^+ группы $O_h = T_d \times C_i$ и симметрична относительно отражения в плоскостях $\theta = 0$, $\varphi = \pi/4$ и $\varphi = \pi/2$ (обозначения соответствуют принятым в книге [15]). В

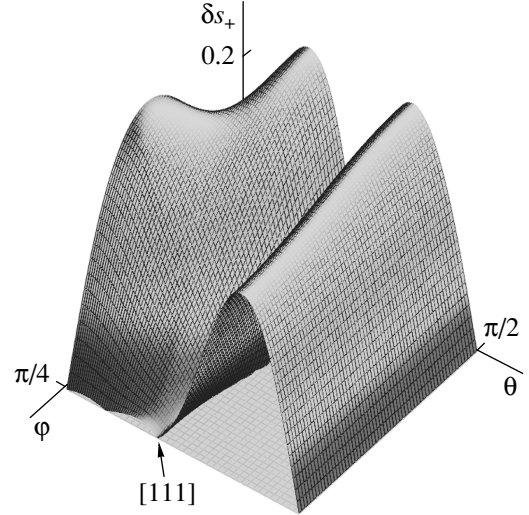


Рис. 4. Отклонение электронного спина от направления магнитного поля, $\delta s_+ = |\mathbf{s}_+ - \mathbf{e}_{x'}/2|$, как функция полярных углов θ и φ , задающих направление магнитного поля. Расчет выполнен для объемного $\text{Al}_{0.12}\text{Ga}_{0.88}\text{As}$, величина магнитного поля равна 100 Тл. Приведен результат расчета для углов в интервалах $0 \leq \theta \leq \pi/2$, $0 \leq \varphi \leq \pi/4$. На остальные углы функция $\delta s_+(\varphi, \theta)$ продолжается с помощью соотношений $\delta s_+(\varphi, \theta) = \delta s_+(\varphi, -\theta)$, $\delta s_+(\varphi, \theta) = \delta s_+(\pi/2 - \varphi, \theta)$ и $\delta s_+(\varphi, \theta) = \delta s_+(\pi - \varphi, \theta)$ (см. разд. 3)

связи с этим на рис. 4 функция $\delta s_+(\theta, \varphi)$ представлена только для углов в пределах прямоугольника $0 \leq \theta \leq \pi/2$, $0 \leq \varphi \leq \pi/4$. Из рисунка следует, что для направлений магнитного поля вдоль главных кристаллографических осей $\langle 001 \rangle$, $\langle 011 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ направления спина электрона и магнитного поля совпадают.

Спин-орбитальный член \hat{H}_{SO}^{ξ} в гамильтониане (4) приводит также к тому, что абсолютная величина g -фактора становится зависимой не только от силы магнитного поля, но и от его направления. Абсолютная величина g -фактора определяет частоту спинового резонанса и вычисляется по спиновому расщеплению энергии основного уровня Ландау:

$$g_{abs}(\theta, \varphi) = \frac{2m_0c}{e\hbar\mathcal{H}} |E_+(\theta, \varphi) - E_-(\theta, \varphi)|,$$

где $E_{\pm}(\theta, \varphi) \equiv E_{0,\pm;0}(\theta, \varphi)$ — энергии электрона в состояниях основного уровня Ландау с противоположными спинами. Конкретный расчет был проведен для чистого антимонида сурьмы GaSb, где наиболее сильны эффекты спин-орбитального взаимодей-

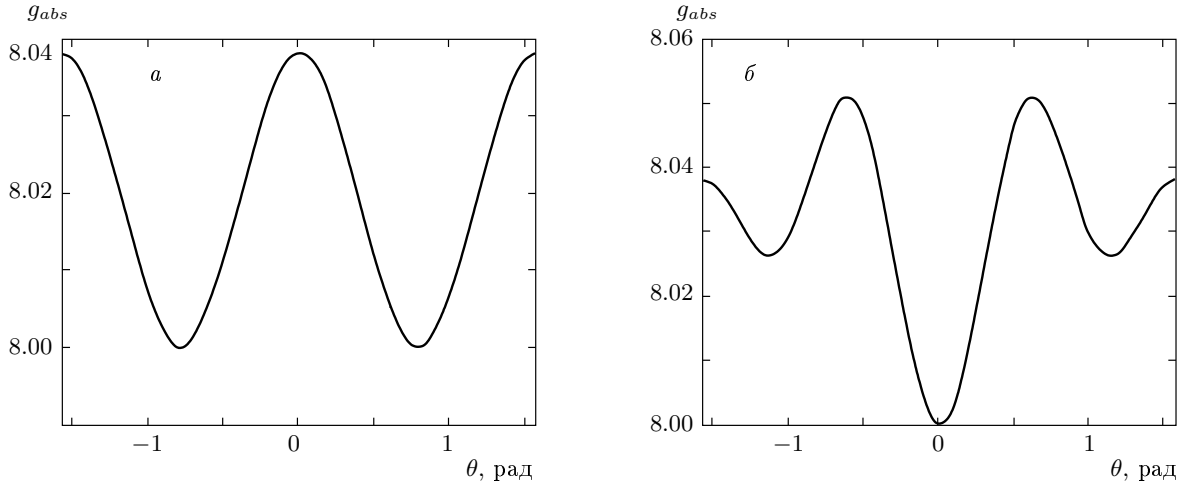


Рис. 5. Зависимость абсолютной величины g -фактора электрона g_{abs} от угла θ при $\varphi = 0$ (а) и при $\varphi = \pi/4$ (б) (углы θ и φ определяют направление магнитного поля относительно главных кристаллографических осей). Магнитное поле равно 100 Тл. Расчет выполнен для чистого антимонида сурьмы GaSb, использовались следующие значения зонных параметров: $m^* = 0.041m_0$, $\gamma = 187 \text{ эВ} \cdot \text{Å}^3$, $g = -8$

ствия. На рис. 5 приведен результат расчета функции $g_{abs}(\theta, \varphi)$ при двух фиксированных значениях угла φ для величины магнитного поля 100 Тл. Видно, что функция $g_{abs}(\theta)$, как и функция $\delta s_+(\theta)$, симметрична относительно точки $\theta = 0$.

4. ОБСУЖДЕНИЕ

Обсудим возможности экспериментального наблюдения предсказанных эффектов. В последнее время очень выросла максимальная величина магнитных полей, которые можно достичь в эксперименте. Наибольшее магнитное поле, которое может быть получено в стационарном режиме, составляет 35 Тл; в импульсном режиме возможно получение полей до 70 Тл [16]. С другой стороны, в работах по изучению спинового резонанса [4, 6] была достигнута большая точность измерения g -фактора электрона (вплоть до 0.001). Таким образом, предсказанные зависимости поправок к g -фактору от величины и направления магнитного поля находятся в рамках экспериментальной достижимости при использовании измерительных техник типа описанных в работах [4, 6].

При этом, правда, возникает проблема отделения поправок к g -фактору электрона, вызванных членом Дрессельхауза, от существующих в объемном материале поправок к g -фактору за счет других зон в четвертом порядке $\mathbf{k}\mathbf{p}$ -теории возмущений [17–19]. Поправки четвертого порядка содержат

изотропную и анизотропную части, которые характеризуются соответственно двумя коэффициентами. Абсолютная величина анизотропного члена всегда много меньше абсолютной величины изотропного члена. Было проведено численное сравнение поправок к g -фактору, вызванных членом Дрессельхауза, с поправками из работы [19]. Во-первых, было установлено, что предсказываемые в настоящей работе поправки к g -фактору и сдвиг энергии основного уровня Ландау для случая $\mathcal{H}||[100]$ при $k = 0$ обычно меньше изотропной части поправок четвертого порядка. Во-вторых, было показано, что для GaAs и GaSb в случае произвольного направления и величины ультраквантового магнитного поля поправки за счет члена спин-орбитального взаимодействия (являющиеся анизотропными) больше анизотропной части поправок за счет $\mathbf{k}\mathbf{p}$ -членов четвертого порядка приблизительно в четыре раза.

В рамках $\mathbf{k}\mathbf{p}$ -гамильтониана четвертого порядка существует также еще один механизм возникновения анизотропных поправок к g -фактору, который становится особенно существен при сильных магнитных полях и поэтому приводит к ограничению сверху области действия рассмотренных поправок за счет спин-орбитального взаимодействия. В кубических полупроводниках первое анизотропное слагаемое в гамильтониане, не содержащее спиновых переменных, имеет вид [19]

$$\hat{H}_{anis}^4 = \beta(\hat{K}_x^4 + \hat{K}_y^4 + \hat{K}_z^4).$$

Этот член, вообще говоря, может быть велик по сравнению с любыми спин-орбитальными членами третьего и четвертого порядка, так как его возникновение не связано со спин-орбитальным взаимодействием. При квантовании Ландау наличие \hat{H}_{anis}^4 приведет к некоторой анизотропии волновых функций. Анизотропия волновых функций, в свою очередь, за счет изотропной, но большой поправки $g'' = h_1 \hat{K}^2$ к g -фактору [17, 19] вызовет дополнительную анизотропию спинового расщепления. Выполним численную оценку влияния этого механизма. Во-первых, определим по теории возмущений поправку к координатной волновой функции χ_0 основного уровня Ландау за счет члена \hat{H}_{anis}^4 :

$$\chi_0^{(1)} \sim \chi_0^{(0)} + \frac{1}{\hbar\omega_c} \langle 2 | \hat{H}_{anis}^4 | 0 \rangle \chi_2^{(0)}.$$

Оценим сверху анизотропный вклад в матричный элемент $\langle 2 | \hat{H}_{anis}^4 | 0 \rangle$ величиной β/l_m^4 . Затем, рассматривая аналогичный (6) спиновый гамильтониан основного уровня Ландау, вычислим анизотропную поправку к спиновому расщеплению за счет поправки $g'' = h_1 \hat{K}^2$ к g -фактору:

$$g''_{anis} \sim \frac{\beta}{\hbar\omega_c l_m^4} h_1 \langle 2 | \hat{K}^2 | 0 \rangle \approx \frac{h_1 \beta m^*}{\hbar^2 l_m^4}.$$

Используя приведенную в работе [17] формулу для расчета константы h_1 и данные по величинам констант β [20, 21], получаем следующие результаты. Для GaAs поправка g''_{anis} сравнивается с поправками за счет спин-орбитального члена при магнитном поле 142 Тл (значение константы $\beta = 490 \text{ эВ} \cdot \text{Å}^4$ определялось из экспериментальных данных [20]), для GaSb поправка g''_{anis} сравнивается с поправками за счет спин-орбитального члена при магнитном поле 130 Тл (было принято расчетное значение константы $\beta = 2850 \text{ эВ} \cdot \text{Å}^4$ [21]). При меньших полях поправка g''_{anis} убывает квадратично по магнитному полю, в то время как поправки за счет спин-орбитального взаимодействия убывают линейно (см. формулы (12)). Отметим, что в собственных состояниях члена $h_1 \hat{K}^2 \mu_B (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\mathcal{H}}) / 2$ спины всегда направлены вдоль или против направления магнитного поля. Поэтому влияние анизотропного члена \hat{H}_{anis}^4 распространяется только на абсолютную величину g -фактора, не приводя к дополнительному отклонению спина от направления магнитного поля.

Таким образом, проведенные оценки показывают, что из предсказанных в настоящей работе эффектов с наибольшей вероятностью могут наблюдаться различные эффекты анизотропии g -фактора в ультраквантовых магнитных полях до 100 Тл.

Эффект отклонения электронных спинов в собственных состояниях от направления магнитного поля приводит к тому, что в термодинамическом равновесии магнитный момент \mathbf{M} системы электронов будет направлен не вдоль магнитного поля $\boldsymbol{\mathcal{H}}$. Однако симметричный анализ показывает, что в кристалле группы T_d у тензора магнитной восприимчивости $\chi_{ij} = \chi_{ij}(\boldsymbol{\mathcal{H}}) = \partial M_i(\boldsymbol{\mathcal{H}}) / \partial \mathcal{H}_j$ недиагональные компоненты невозможны. Это означает, что эффект магнитной анизотропии хотя и должен существовать, но появляется в более высоких порядках по магнитному полю, а также в таких сильных полях, что зависимость $\mathbf{M}(\boldsymbol{\mathcal{H}})$ становится существенно нелинейной. Ситуация аналогична магнитной анизотропии в кубических ферромагнетиках, где в разложении свободной энергии по направляющим косинусам магнитного поля относительно главных осей кристалла появляются члены только в четвертом и шестом порядках [22]. Рассмотренные анизотропные поправки к g -фактору представляют собой микроскопический механизм возникновения магнитной анизотропии в кубических полупроводниках без центра инверсии при $\hbar\omega_c \gg E_F$. Экспериментально эффект отклонения магнитного момента \mathbf{M} от направления магнитного поля $\boldsymbol{\mathcal{H}}$ наиболее вероятно может быть выявлен для материалов типа $\text{Al}_{0.12}\text{Ga}_{0.88}\text{As}$ с малой величиной g -фактора.

Отклонение электронных спинов от направления магнитного поля может также существенно влиять на скорость спиновой релаксации электронов в ультраквантовом продольном магнитном поле по механизму Дьяконова–Переля. Если возбужденный параллельно магнитному полю спин находится не в собственном состоянии гамильтониана, то он претерпевает прецессию, рассеяние и, следовательно, релаксацию. Наличие направлений, вдоль которых спин все-таки находится в собственных состояниях (см. рис. 4), приводит к тому, что время спиновой релаксации становится сильноанизотропным при изменении направления магнитного поля. Для полей $\hbar\omega_c \sim E_F$ этот эффект был экспериментально и теоретически изучен в работе [7]. Для случая более сильных магнитных полей, когда заполнен только основной уровень Ландау, можно ожидать проявления похожих эффектов за счет спин-орбитальных поправок, изученных в настоящей работе.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе исследованы спиновые поправки к электронным состояниям в объемных полупроводниках

со структурой цинковой обманки при наличии ультраквантового магнитного поля. Показано, что член спин-орбитального взаимодействия приводит к сдвигу уровней Ландау, изменению величины g -фактора и несовпадению направлений электронного спина и магнитного поля. Конкретные расчеты были выполнены для твердого раствора $\text{Al}_{0.12}\text{Ga}_{0.88}\text{As}$, где величина g -фактора близка к нулю, а также для чистого GaSb, где особенно сильно спин-орбитальное взаимодействие. Обсуждались способы экспериментального наблюдения предсказанных эффектов.

Автор выражает глубокую благодарность М. М. Глазову за помощь при составлении списка литературы, Н. С. Аверкиеву, А. П. Алексеевой, И. Н. Яснеевич за чтение рукописи и советы по ее улучшению, а также А. А. Грешнову, А. П. Дмитриеву, Е. Л. Ивченко за обсуждения в процессе работы над статьей. Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (гранты №№ 07-02-00315, 08-02-00222), гранта Президента Российской Федерации для поддержки ведущих научных школ (НШ-1972.2008.2), а также гранта фонда «Династия».

ЛИТЕРАТУРА

1. L. M. Roth, S. H. Groves, and P. W. Wyatt, Phys. Rev. Lett. **19**, 576 (1967).
2. L. M. Roth, Phys. Rev. **173**, 755 (1968).
3. A. P. Heberle, W. W. Ruhle, and K. Ploog, Phys. Rev. Lett. **72**, 3887 (1994).
4. M. Dobers, K. v. Klitzing, and G. Weimann, Phys. Rev. B **38**, 5453 (1988).
5. M. J. Snelling, G. P. Flinn, A. S. Plaut et al., Phys. Rev. B **44**, 11345 (1991).
6. Y.-F. Chen, M. Dobrowolska, and J. K. Furdyna, Phys. Rev. B **31**, 7989 (1985).
7. Б. П. Захарченя, Е. Л. Ивченко, А. Я. Рыскин и др., ФТТ **18**, 230 (1976).
8. Э. И. Рашба, ФТТ **2**, 1224 (1960).
9. N. S. Averkiev, M. M. Glazov, and S. A. Tarasenko, Sol. St. Comm. **133**, 543 (2004).
10. M.-C. Chang, Phys. Rev. B **71**, 085315 (2005).
11. J. M. Luttinger and W. Kohn, Phys. Rev. **97**, 869 (1955).
12. П. С. Алексеев, М. В. Якунин, И. Н. Яснеевич, ФТП **41**, 1110 (2007).
13. D. R. Hofstadter, Phys. Rev. B **14**, 2239 (1976).
14. W. Kohn, Phys. Rev. **115**, 1460 (1959).
15. Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус, *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках*, Наука, Москва (1972), с. 179.
16. <http://ghmfl.grenoble.cnrs.fr>.
17. Е. Л. Ивченко, А. А. Киселев, ФТП **26**, 1471 (1992).
18. E. L. Ivchenko and G. E. Pikus, *Superlattices and Other Heterostructures. Symmetry and Optical Phenomena*, Springer, Berlin (1995), p. 220.
19. M. Braun and U. Rössler, J. Phys. C **18**, 3365 (1985).
20. M. A. Hopkins, G. J. Nicholas, P. Pfeffer et al., Semicond. Sci. Technol. **2**, 568 (1987).
21. H. I. Zhang, Phys. Rev. B **1**, 3450 (1970).
22. С. В. Вонсовский, *Магнетизм. Магнитные свойства диа-, пара-, ферро-, антиферро- и ферримагнетиков*, Наука, Москва (1971), с. 778.