

АНИЗОТРОПНЫЙ СПИН-ОРБИТАЛЬНЫЙ ЭФФЕКТ ШТАРКА В КУБИЧЕСКИХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ БЕЗ ЦЕНТРА ИНВЕРСИИ

П. С. Алексеев*

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

Поступила в редакцию 16 марта 2015 г.

Изучается влияние внешних электрического и магнитного полей на уровни мелкого донора в полупроводнике кристаллического класса T_d . Приложение электрического поля приводит к исчезновению симметрии потенциала донора относительно пространственной инверсии, в результате чего у донорных уровней возникают поправки от нечетного по импульсу спин-орбитального слагаемого Дрессельхауза. В достаточно сильном электрическом поле такие поправки будут определять анизотропию спинового расщепления уровней донора относительно направлений внешних полей в кристаллографической системе координат. Найдены аналитические выражения для анизотропии спинового расщепления при различных соотношениях между величинами магнитного и электрического полей. Полученные результаты могут быть использованы для определения константы спин-орбитального взаимодействия Дрессельхауза новым способом: в экспериментах по измерению спинового расщепления уровней донора.

DOI: 10.7868/S0044451015090138

1. ВВЕДЕНИЕ

Эффект Штарка для экситонов и мелких примесей в полупроводниках и полупроводниковых наноструктурах представляет собой яркое доказательство водородоподобной природы состояний электрона в этих системах [1]. В связи с появлением более чувствительных измерительных методик, в последнее время было получено значительное число новых результатов по эффекту Штарка для локализованных состояний в полупроводниках. С помощью метода туннельной спектроскопии обнаружен эффект Штарка для одиночного акцептора, находящегося в кремниевой гетероструктуре вблизи барьера Шотки [2]. Проведено подробное изучение эффекта Штарка для квантовых точек (кремниевых нанокристаллов) по спектрам поглощения [3]. Теоретически изучен эффект Штарка для донорной и акцепторной примесей в кремнии [4, 5], для электрон-дырочных пар в квантовых точках в полупроводниках с простой и сложной зонами [6].

В кубических полупроводниках кристаллического класса T_d (GaAs, InSb и др.) состояния электрона около вершины зоны проводимости являются

приблизительно симметричными относительно направлений волнового вектора, поэтому зеemanовское расщепление уровней свободного электрона и электрона на доноре слабо зависит от направления магнитного поля относительно кристаллографических осей. В отсутствие электрического поля кристаллическая анизотропия зеemanовского расщепления уровней мелкого донора в GaAs экспериментально изучалась методом циклотронного резонанса в работе [7]. Было показано, что анизотропия расщепления уровней определяется непараболическим слагаемым типа зависимости g -фактора от импульса и не отражает специфики группы симметрии T_d . Однако приложение электрического поля может изменить характер анизотропии зеemanовского расщепления. В электрическом поле у волновых функций электрона на доноре появляется асимметричность в направлении электрического поля. Группа T_d не содержит операции пространственной инверсии, что приводит к наличию в гамильтониане электрона анизотропного, кубического по волновому вектору спин-орбитального слагаемого Дрессельхауза. Поэтому в электрическом поле возникают анизотропные поправки к зеemanовским подуровням от слагаемого Дрессельхауза, которые при достаточно большой величине электрического поля будут определять анизотропию зеemanовского расщепления.

*E-mail: pavel.alekseev@mail.ioffe.ru

В настоящей работе, во-первых, рассчитана анизотропия зеемановского расщепления уровней мелкого донора в полупроводнике класса T_d в отсутствие электрического поля в пределе слабого магнитного поля, когда боровская энергия донора E_B много больше циклотронной энергии $\hbar\omega_c$ (в работе [7] изучался противоположный предел $E_B \ll \hbar\omega_c$). Во-вторых, показано, что с приложением электрического поля возникает анизотропия спинового расщепления уровней донора другого характера, специфическая для симметрии T_d и обусловленная спин-орбитальным взаимодействием Дрессельхауза. В этой связи изучаемый эффект анизотропии зеемановского расщепления уровней донора в электрическом поле можно назвать анизотропным спин-орбитальным эффектом Штарка. Показано, что величина эффекта зависит от направлений магнитного и электрического полей как комбинация двух инвариантных полиномов группы T_d . Изучаемый эффект по своей природе близок к эффекту анизотропии зеемановского расщепления уровней размерного квантования электрона в асимметричных квантовых ямах GaAs/AlGaAs за счет взаимодействия Дрессельхауза [8–10].

В настоящее время в литературе существуют сильные разночтения относительно величины спин-орбитальной константы Дрессельхауза γ в различных полупроводниках [11, 12]¹⁾. Применение современных способов измерения спинового расщепления электронных уровней, таких как измерение временной динамики электронного спина методом «накачка–зондирование», может позволить изучить зеемановское расщепление уровней мелкого донора во внешних полях более точно и подробно, чем это было сделано в работе [7], и по полученным данным определить значение γ с помощью формул настоящей статьи.

¹⁾ Например, в работе [11] на основе измерения спинового расщепления электронного спектра в квантовых ямах GaAs/AlGaAs был сделан вывод, что объемная константа γ в GaAs примерно в два раза меньше, чем ранее устоявшееся в литературе значение [12]. Такая интерпретация экспериментальных данных [11] представляется автору настоящей статьи неверной, так как в работах [13, 14] было показано, что анизотропия спинового расщепления электронного спектра в квантовых ямах связана не только с объемным взаимодействием Дрессельхауза в слоях гетероструктуры, но и с наличием анизотропных спин-орбитальных слагаемых, локализованных на интерфейсах ямы.

2. ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ

Гамильтониан, описывающий движение электрона в поле мелкого донора в полупроводнике класса T_d , для рассматриваемой задачи необходимо выбрать в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_D + \hat{H}_g, \quad (1)$$

где \hat{H}_0 и \hat{H}_D — слагаемые квадратичного и кубического приближений $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -метода, \hat{H}_g представляет собой анизотропную спин-зависимую часть приближения четвертого порядка $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -метода.

Слагаемое \hat{H}_0 при наличии внешних однородных электрического и магнитного полей \mathbf{F} и \mathbf{H} имеет вид

$$\begin{aligned} \hat{H}_0 &= \hat{H}_{orb} + \hat{H}_s, \\ \hat{H}_{orb} &= \frac{\hbar^2 \hat{K}^2}{2m_c} + V(\mathbf{r}) + e\mathbf{F} \cdot \mathbf{r}, \\ \hat{H}_s &= \frac{\Delta}{2} \mathbf{h} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}, \end{aligned} \quad (2)$$

где \hat{H}_{orb} — орбитальная часть \hat{H}_0 , m_c — эффективная масса электрона, $\hat{\mathbf{K}} = \hat{\mathbf{k}} + e\mathbf{A}/c\hbar$ — оператор кинематического импульса, e — абсолютная величина заряда электрона, $\hat{\mathbf{k}} = -i\partial/\partial\mathbf{r}$ — оператор обобщенного импульса, \hat{H}_s — слагаемое спинового эффекта Зеемана, $\mathbf{h} = \mathbf{H}/H$, $\Delta = g\mu_B H$. Потенциал донора считаем кулоновским: $V(\mathbf{r}) = -e^2/\epsilon r$, пренебрегая поправкой «потенциала центральной ячейки» (для состояний мелкой примеси «потенциал центральной ячейки» дает только поправку к энергии основного уровня, не меняя структуру волновых функций). Векторный потенциал удобно выбрать в виде, учитывающем центральную симметрию потенциала $V(\mathbf{r})$ относительно центра примеси:

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} [\mathbf{H} \times \mathbf{r}]. \quad (3)$$

Орбитальное слагаемое \hat{H}_{orb} в (2) приобретает вид

$$\hat{H}_{orb} = \frac{\hbar^2 \hat{k}^2}{2m_c} + V(\mathbf{r}) + \hat{H}_Z + e\mathbf{F} \cdot \mathbf{r}, \quad (4)$$

где \hat{H}_Z описывает орбитальный эффект Зеемана:

$$\hat{H}_Z = \Delta_1 \mathbf{h} \cdot \frac{\mathbf{L}}{\hbar} + \frac{\Delta_2}{8} \left[\mathbf{h} \times \frac{\mathbf{r}}{a} \right]^2. \quad (5)$$

Здесь $a = \hbar^2 \epsilon / m_c e^2$ — боровский радиус, $\Delta_1 = \hbar^2 / 2m_c \lambda^2$, $\Delta_2 = \hbar^2 a^2 / m_c \lambda^4$, $\lambda = \sqrt{c\hbar / eH}$ — магнитная длина. За счет выбранной формы векторного потенциала (3), первое слагаемое в правой части (5) определяет линейный эффект Зеемана, второе — квадратичный.

Слагаемое \hat{H}_D в (1) есть спин-орбитальное слагаемое Дрессельхауза, кубическое по кинематическому импульсу²⁾:

$$\hat{H}_D = \gamma \hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}, \quad (6)$$

$$\hat{k}_i = \hat{K}_{i+1} \hat{K}_i \hat{K}_{i+1} - \hat{K}_{i+2} \hat{K}_i \hat{K}_{i+2},$$

где γ — спин-орбитальная константа Дрессельхауза; индексы $i = x, y, z$ обозначают компоненты вектора в системе координат xyz , оси которой выбраны вдоль кристаллографических осей [100], [010], [001]. Выражение (6) является анизотропным и допустимо благодаря отсутствию операции пространственной инверсии в группе T_d . Гамильтониан \hat{H}_g в (1) пропорционален магнитному полю и квадратичен по кинематическому импульсу:

$$\hat{H}_g = \eta \hat{\boldsymbol{\sigma}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}, \quad \hat{\tau}_i = H_i \hat{K}_i^2, \quad (7)$$

где η — еще одна спин-орбитальная константа зонной структуры. Слагаемое (7) можно назвать слагаемым типа анизотропии g -фактора; оно не связано с отсутствием в группе T_d операции пространственной инверсии.

Мы пренебрегаем изотропным спин-орбитальным взаимодействием, возникающим за счет электрического поля примеси (слагаемое, аналогичное слагаемому Бычкова–Рашбы в асимметричных квантовых ямах):

$$\hat{H}_{BR} = \beta ([\nabla V(\mathbf{r}) \times \hat{\mathbf{K}}]_{symm}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}, \quad (8)$$

где $(\hat{A}\hat{B})_{symm} = (\hat{A}\hat{B} + \hat{B}\hat{A})/2$. В отсутствие внешних полей взаимодействие (8) приводит к расщеплению уровней донора по квантовому числу полного момента $j = l \pm 1/2$ [7]. Пренебрегая слагаемым \hat{H}_{BR} , мы тем самым считаем, что состояния электрона на примеси построены по типу ls -связи. Такое приближение оправдано, если магнитное поле велико настолько, что спиновое зеемановское расщепление каждого уровня много больше тонкого расщепления за счет (8).

3. СОСТОЯНИЯ ЭЛЕКТРОНА НА ДОНОРЕ ВО ВНЕШНИХ ПОЛЯХ БЕЗ УЧЕТА АНИЗОТРОПИИ ЗОНЫ ПРОВОДИМОСТИ

Будем изучать уровни донора, которые образовались из водородоподобных термов с основным квантовым числом $n = 1, 2, 3$ за счет приложения внешних магнитного и электрического полей.

²⁾ Относительно выбора порядка некоммутирующих операторов \hat{K}_j в выражениях для операторов \hat{k}_i см. [15].

Во-первых, рассмотрим режим “А”, в котором на примесь воздействует растущее от нуля электрическое поле при наличии фиксированного магнитного поля. Для этого сначала опишем состояния электрона на доноре в магнитном поле при полном отсутствии электрического поля. Невозмущенные волновые функции в этом режиме нужно выбрать в виде волновых функций атома водорода $|t, \pm\rangle$, в которых $t = nl_m$ — индекс орбитальной части волновой функции, m — проекция углового момента на направление магнитного поля \mathbf{h} , символы \pm соответствуют направлению спина вдоль или против \mathbf{h} .

Будем считать, что в гамильтониане \hat{H}_{orb} (4) «магнитное» слагаемое \hat{H}_Z мало по сравнению с основным слагаемым $\hbar^2 \hat{k}^2 / 2m_c + V(\mathbf{r})$. Такая ситуация соответствует неравенству $\lambda \gg a$ (эквивалентному $\hbar\omega_c \ll E_B$) и позволяет при расчете уровней энергии в рамках гамильтониана \hat{H}_{orb} применять теорию возмущений по члену \hat{H}_Z (5).

В линейном орбитальном эффекте Зеемана уровень $n = 2$ расщепляется на три подуровня с $m = -1, 0, 1$, расстояние между которыми есть Δ_1 ; уровень $n = 3$ расщепляется на пять подуровней с $m = -2, -1, 0, 1, 2$, расстояние между которыми также равно Δ_1 (см. рис. 1). Совпадение в рамках линейного эффекта Зеемана энергий уровней $2s$ и $2p_0$; $3s$, $3p_0$ и $3d_0$; $3p_{\pm 1}$ и $3d_{\pm 1}$ исчезает из-за квадратичного эффекта Зеемана, который приводит к различным сдвигам уровней на величины порядка $\Delta_2 \ll \Delta_1$. Каждый из получившихся уровней nl_m за счет спинового эффекта Зеемана расщеплен на два спиновых подуровня \pm , расстояние между которыми равно Δ . Таким образом, существенные для нас вклады в энергии описанных состояний $|t, \pm\rangle$, $t = nl_m$, в рамках гамильтониана \hat{H}_0 (2) даются формулами

$$E_{nl_m, \pm} = -\frac{E_B}{n^2} + m \Delta_1 + \frac{\langle nl_m | (\tilde{x}')^2 | nl_m \rangle}{4} \Delta_2 \pm \frac{\Delta}{2}. \quad (9)$$

Здесь и далее $\tilde{\mathbf{r}}' = \mathbf{r}'/a$, система координат $x'y'z'$ связана с направлением магнитного поля: $\mathbf{e}_{z'} = \mathbf{h}$. В силу того, что во многих полупроводниках gm_c/m_0 есть малая величина, существен диапазон магнитных полей $gm_c/m_0 \ll a^2/\lambda^2 \ll 1$, когда квадратичный орбитальный эффект Зеемана доминирует над спиновым эффектом Зеемана.

Будем изучать анизотропию зеемановского расщепления уровней $1s$, $2p_0$, $2p_{+1}$, $2p_{-1}$, $3p_{+1}$; эти уровни являются оптически-активными для дипольных переходов, например, в работе [7] для них удалось

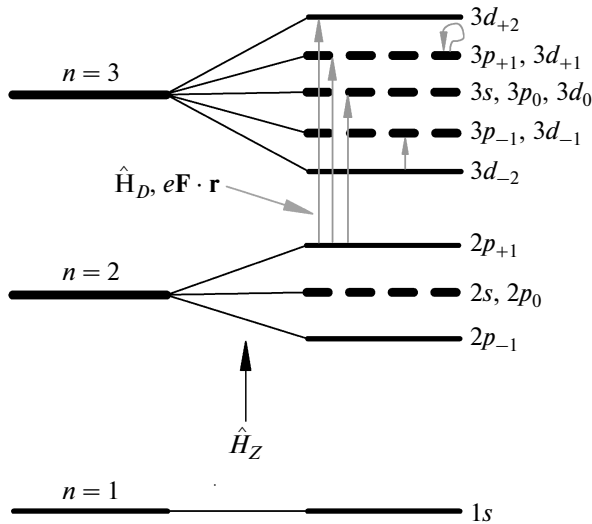


Рис. 1. Уровни энергии мелкого донора в рамках гамильтониана \hat{H}_{orb} в режиме “А” малого электрического поля $eFa \ll \Delta_2$, когда доминирующее влияние на расположение уровней оказывает магнитное поле. Осью квантования углового момента и спина является направление магнитного поля \mathbf{h} . Группы уровней, совпадающие в рамках линейного орбитального эффекта Зеемана, показаны жирными штриховыми линиями; вырождение таких уровней снимается малым квадратичным эффектом Зеемана. Серые стрелки указывают на уровни, которые дают вклад в анизотропные поправки к уровням энергии $2p_{+1}$, $3d_{-2}$, $3p_{+1}$ за счет взаимодействий \hat{H}_D и $e\mathbf{F} \cdot \mathbf{r}$. Спиновое расщепление уровней за счет слагаемого \hat{H}_s предполагается много меньшим расстояний между бесспиновыми уровнями, определяемыми слагаемым \hat{H}_{orb}

наблюдать спиновое расщепление и его анизотропию в отсутствие электрического поля. Для расчета поправок к этим уровням по теории возмущений нам потребуются волновые функции d -уровней.

Рассмотрим влияние на описанные состояния произвольно направленного малого электрического поля \mathbf{F} . Критерий того, что электрическое поле мало и вносит только возмущение в описанную выше картину, задается неравенством $eFa \ll \Delta_2$. Электрическое поле приводит к смешиванию бесспиновых волновых функций в соответствии с формулой

$$|t^*\rangle = |t\rangle + \sum_{t' \neq t} \frac{e\mathbf{F} \cdot \langle t'|\mathbf{r}|t\rangle}{E_t - E_{t'}} |t'\rangle. \quad (10)$$

Для оператора координаты ненулевыми являются только матричные элементы между термами с соседними l, l' и одинаковыми и соседними m, m' [16].

Поэтому в сумму в формуле (10) для уровней $t = ns$ входят члены с $t' = n'p_{0,\pm 1}$, для уровней $t = np_0$ — члены с $t' = n's$ и $t' = n'd_{0,\pm 1}$, а для уровней $t = np_m, |m| = 1$, — члены с $t' = n's$ и $t' = n'd_{0,m,2m}$. При этом возможны два случая: в сумме встречаются слагаемые с t и t' с одинаковыми n и n' , $n = n'$; или же встречаются только пары с t и t' , относящиеся к термам с разными n и n' , $n \neq n'$. В первом случае основной вклад происходит именно от слагаемых с t и t' , у которых $n = n'$, так как их знаменатели малы: $|E_t - E_{t'}| \ll E_B$. Во втором случае $|E_t - E_{t'}| \sim E_B$ для всех t' , и для данного t одинаково существенными являются слагаемые с t' , относящиеся к термам с разными n' , а также слагаемые с t' из непрерывного спектра. Однако для кулоновских состояний учет даже первого исчезающего члена в (10) даст величину рассчитываемого эффекта с точностью до небольшого численного множителя, так как матричные элементы координаты между состояниями с различными n и n' убывают как $1/(n')^3$ при $n' \rightarrow \infty$ [17]. Поэтому в расчетах по формуле (10) из состояний симметрии d будем учитывать только состояния $3d_{m=0,\pm 1,\pm 2}$.

Во-вторых, рассмотрим режим “В”, в котором к донору прикладывается растущее от нуля магнитное поле при наличии фиксированного электрического поля. Для этого сначала опишем уровни донора в электрическом поле при полном отсутствии магнитного поля. В режиме “В” осью квантования углового момента удобно выбрать направление электрического поля $\mathbf{f} = \mathbf{F}/F$, т. е. невозмущенными волновыми функциями считать функции $|nl_m\rangle$, где m — проекция углового момента на направление \mathbf{f} . Пусть слагаемое $e\mathbf{F} \cdot \mathbf{r}$ в гамильтониане \hat{H}_{orb} (4) является возмущением относительно основного слагаемого $\hbar^2 \hat{k}^2 / 2m_e + V(\mathbf{r})$, что соответствует неравенству $eFa \ll E_B$.

Ограничимся рассмотрением уровней, образовавшихся из термов $n = 1, 2$. В нулевом магнитном поле и фиксированном электрическом поле для уровня $n = 2$ возникает линейный эффект Штарка: уровень расщепляется на три подуровня $t^{**} = F_{\pm}, F_0$, где

$$|F_0\rangle = \{|2p_{+1}\rangle, |2p_{-1}\rangle\}$$

— дважды вырожденный уровень,

$$|F_{\pm}\rangle = (|2s\rangle \pm i|2p_0\rangle) / \sqrt{2}$$

— уровни, лежащие выше и ниже уровня F_0 на энергию $3eFa$ (см. рис. 2). Квадратичный штарковский сдвиг уровней F_0 и $1s$ для нас несуществен. Спиновая часть волновых функций для всех уровней

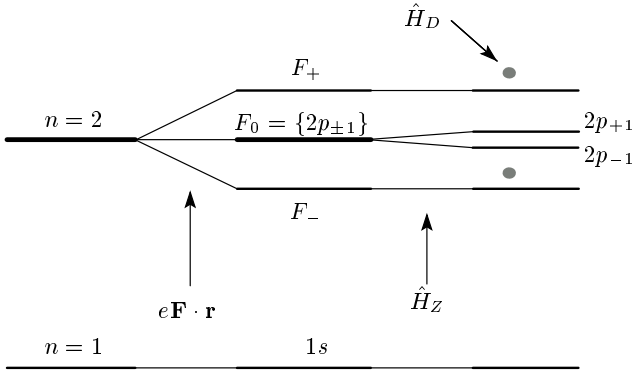


Рис. 2. Уровни энергии мелкого донора в рамках гамильтониана \hat{H}_{orb} в режиме “В” большого электрического поля $eFa \gg \Delta_1$, когда доминирующее влияние на расположение уровней оказывает электрическое поле. Осью квантования углового момента является направление электрического поля \mathbf{f} , осью квантования спина — направление магнитного поля \mathbf{h} . Жирными линиями показаны уровни, вырожденные в отсутствие магнитного поля. Уровни, у которых присутствуют изучаемые анизотропные поправки к энергии за счет взаимодействия \hat{H}_D , отмечены серыми точками. Спиновое расщепление уровней за счет слагаемого \hat{H}_s предполагается много меньшим расстояний между бесспиновыми уровнями, определяемыми слагаемым \hat{H}_{orb}

$1s, F_0, F_{\pm}$ есть $|\pm\rangle$, где символы \pm , как и ранее, означают направление спина в соответствующем состоянии вдоль или против \mathbf{h} .

Рассмотрим влияние на состояния $|t^{**}, \pm\rangle$ произвольно направленного малого магнитного поля. В системе координат $x^*y^*z^*$, связанной с направлением электрического поля ($\mathbf{e}_{z^*} = \mathbf{f}$), средние значения оператора углового момента для состояний t^{**} имеют вид

$$\langle 1s | \hat{\mathbf{L}} | 1s \rangle = 0, \quad \langle 2p_{\pm 1} | \hat{\mathbf{L}} / \hbar | 2p_{\pm 1} \rangle = (0, 0, \pm 1),$$

$$\langle F_{\pm} | \hat{\mathbf{L}} | F_{\pm} \rangle = 0.$$

Поэтому линейный орбитальный эффект Зеемана за счет первого члена в \hat{H}_Z возникает только для центрального штарковского уровня F_0 (см. рис. 2). Соответствующее расщепление уровня $2\Delta_1^*$ пропорционально проекции магнитного поля на направление электрического поля: $\Delta_1^* = \Delta_1 \mathbf{h} \cdot \mathbf{f}$. Кроме того, каждый из уровней $t^{**} = 1s, F_0, F_{\pm}$ расщепляется по спину на величину Δ , пропорциональную полному

магнитному полю. Таким образом, энергии состояний $|t^{**}, \pm\rangle$ в рамках гамильтониана (2) имеют вид

$$\begin{aligned} E_{1s, \pm} &= -E_B \pm \frac{\Delta}{2}, \\ E_{2p_m, \pm} &= -\frac{E_B}{4} + m \Delta_1^* \pm \frac{\Delta}{2}, \quad m = \pm 1, \\ E_{F_{\pm}, \pm} &= -\frac{E_B}{4} \pm 3eFa \pm \frac{\Delta}{2}. \end{aligned} \quad (11)$$

Критерием малости магнитного поля является неравенство $3eFa \gg \Delta_1^*$.

4. АНИЗОТРОПИЯ ЗЕЕМАНОВСКОГО РАСЩЕПЛЕНИЯ УРОВНЕЙ ДОНОРА В ОТСУТСТВИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ

В работе [7] рассчитана анизотропия зеемановского расщепления уровней мелкого донора в отсутствие электрического поля в пределе большого магнитного поля $\lambda \ll a$. К настоящему времени не рассмотренным остался противоположный случай малых полей $\lambda \gg a^3$. Он представляет специальный интерес, так как при $\lambda \gg a$ магнитное поле вызывает малые поправки к кулоновским состояниям донора, которые можно точно учесть аналитически. В противоположном же режиме $\lambda \ll a$ только при чрезвычайно больших значениях параметра a/λ волновые функции приближаются к своей асимптотической форме, соответствующей пределу $\lambda \rightarrow 0$ [20].

Вклад от члена \hat{H}_D в уровни энергии в первом порядке теории возмущений при $F = 0$ отсутствует. Действительно, при включении магнитного поля сохраняется классификация волновых функций $|t\rangle = |nl_m\rangle$ относительно пространственной инверсии, так как магнитное поле есть аксиальный вектор. Для матричных элементов $\langle t, \pm | \hat{H}_D | t, \pm \rangle$ операция пространственной инверсии меняет только знак \hat{H}_D , и поэтому

$$\langle t, \pm | \hat{H}_D | t, \pm \rangle = 0.$$

Анизотропия спинового расщепления уровней t, \pm (9) в отсутствие электрического поля обусловлена поправками первого приближения теории возмущений от взаимодействия \hat{H}_g (7):

$$\Delta E_{t, \pm} = \langle t, \pm | \hat{H}_g | t, \pm \rangle. \quad (12)$$

Некоторые подробности вычисления этих величин приведены в Приложении. Поправка к энергии (12)

³⁾ Заметим, что в достаточно больших магнитных полях состояния мелкого донора с $n > 2$ превращаются в резонансные состояния [18, 19].

Таблица. Коэффициенты, входящие в выражение для поправок к энергиям зеемановских подуровней от слагаемого \hat{H}_g

t	α_t	β_t	γ_t
$1s$	0	0	$-1/4$
$2p_0$	$1/10$	0	$-3/2$
$2p_{\pm 1}$	$-1/20$	$\mp 1/2$	-3
$3p_{+1}$	$-1/45$	$-1/2$	-18

разделяется на выражение, пропорциональное анизотропному полиному кубической симметрии

$$P^{(4)}(\mathbf{h}) = h_x^4 + h_y^4 + h_z^4,$$

и на изотропное выражение. Анизотропная часть поправки к энергии равна

$$\Delta E_{t,\pm} = \pm \eta H \left(\alpha_t \frac{1}{a^2} + \beta_t \frac{1}{\lambda^2} + \gamma_t \frac{a^2}{\lambda^4} \right) P^{(4)}(\mathbf{h}), \quad (13)$$

где $\alpha_t, \beta_t, \gamma_t$ — безразмерные коэффициенты, определяемые формулами

$$\alpha_t = \langle t | -\hat{k}_x^2 + \hat{k}_z^2 | t \rangle, \quad \beta_t = \langle t | \hat{k}_x \hat{y} | t \rangle,$$

$$\gamma_t = -\frac{1}{4} \langle t | (\tilde{x}')^2 | t \rangle.$$

Удерживать в формуле (13) все члены, пропорциональные разным степеням a/λ , несмотря на то, что $a/\lambda \ll 1$, необходимо, так как в зависимости от уровня t некоторые коэффициенты $\alpha_t, \beta_t, \gamma_t$ равны нулю или представляют собой сильно различающиеся ненулевые числа (см. таблицу).

Из таблицы видно, что анизотропия спинового расщепления основного уровня $1s$ кубически зависит от магнитного поля. Этот результат аналогичен результату работы [21] для анизотропии спинового расщепления уровня размерного квантования электрона в симметричной квантовой яме.

При магнитных полях $\lambda \sim a$ формула (13), полученная для случая $\lambda \gg a$, и формула для анизотропии зеемановского расщепления из статьи [7], полученная в пределе $\lambda \ll a$, совпадают с точностью до численного множителя.

5. АНИЗОТРОПИЯ ЗЕЕМАНОВСКОГО РАСЩЕПЛЕНИЯ УРОВНЕЙ ДОНОРА ПРИ НАЛИЧИИ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ

При наличии электрического поля \mathbf{F} волновые функции электрона асимметричны в направлении

\mathbf{F} , поэтому поправки к уровням энергии от нечетного по импульсу взаимодействия Дрессельхауза \hat{H}_D (6) существуют. С ростом F эти поправки приведут к тому, что описанная в разд. 4 анизотропия спинового расщепления уровней (13) за счет взаимодействия \hat{H}_g будет подавлена анизотропией спинового расщепления другого характера за счет взаимодействия \hat{H}_D .

Рассмотрим сначала режим “А”⁴⁾. Искомый эффект представляет собой поправку второго порядка теории возмущений к уровням t, \pm (9) за счет слагаемых $e\mathbf{F} \cdot \mathbf{r}$ и \hat{H}_D . Формулу для расчета такой поправки можно представить в виде

$$\Delta E_{t,\pm} = \langle t^*, \pm | \hat{H}_D | t^*, \pm \rangle, \quad (14)$$

где $|t^*\rangle$ — волновые функции (10), t^* соответствует t . В силу инвариантности функций $|t^*\rangle$ относительно инверсии времени, средние значения произведений нечетного числа операторов обобщенного импульса $\langle t^* | \hat{k}_i \hat{k}_j \hat{k}_i | t^* \rangle$ равны нулю. Неисчезающий результат для величин $\langle t^* | \hat{K}_i \hat{K}_j \hat{K}_i | t^* \rangle$, входящих в (14), возникает в следующем, первом, порядке по векторному потенциалу \mathbf{A} . Расчет величин $\Delta E_{t,\pm}$ выполнялся комбинированием методов теории групп и прямых аналитических преобразований; некоторые подробности расчета приведены в Приложении. Результат имеет вид

$$\Delta E_{t,\pm} = \pm \frac{\gamma}{\lambda^2} \frac{eF}{\Lambda_t} [C_t (f_x h_y h_z + f_y h_x h_z + f_z h_x h_y) + D_t (\mathbf{f} \cdot \mathbf{h}) h_x h_y h_z], \quad (15)$$

где Λ_t — характерное расстояние от уровня t до ближайших к нему уровней t' ; C_t, D_t — численные константы.

Для уровней $t = 3p_{\pm 1}$ основной вклад в ответ дает уровень $t' = 3d_{\pm 1}$, при этом $\Lambda_t = 9\Delta_2 \ll E_B$, и для коэффициентов получаем: $C_{3p_{\pm 1}} = 0$ и $D_{3p_{\pm 1}} = -9/7$. Для уровней $t = 3d_{\pm 2}$ основной вклад в ответ дает уровень $t' = 3p_{\pm 1}$, при этом $\Lambda_t = \Delta_1 \ll E_B$, и для коэффициентов получаем: $C_{2d_{\pm 2}} = -9/56$ и $D_{2d_{\pm 2}} = 27/56$. Для уровней $2p_0, 2p_{\pm 1}$ имеем $\Lambda_t = E_B$, т.е. в величину $\Delta E_{t,\pm}$ дают сравнимые вклады все состояния симметрии d с квантовыми числами $n > 2$, а также состояния непрерывного спектра, в которых d -компонента присутствует для состояния любой энергии $E > 0$. Учет только уровней $t' = 3d_{m'}$ дает для коэффициентов оценку $C_{2p_m}, D_{2p_m} \sim 1$.

⁴⁾ Электрическое поле на анизотропию спинового расщепления уровней за счет слагаемого \hat{H}_g в режиме “А” влияет слабо, в меру параметра $eFa/E_B \ll 1$.

Для уровней симметрии s эффект возникает за счет подмешивания к состоянию s волновых функций $t' = n'p$, $t'' = n''p$ и $t_2 = n_2d$, между которыми матричные элементы $\langle t', t'' | \hat{H}_D | t_2 \rangle$ отличны от нуля, поэтому эффект возникает только в третьем порядке по электрическому полю.

В режиме “В” поправки к уровням t^{**}, \pm (11) от члена \hat{H}_D возникают уже в первом приближении теории возмущений по одному взаимодействию \hat{H}_D :

$$\Delta E_{t^{**}, \pm} = \langle t^{**}, \pm | \hat{H}_D | t^{**}, \pm \rangle. \quad (16)$$

С помощью анализа, аналогичного проведенному для режима “А” (см. Приложение), из (16) получаем, что поправки первого порядка по \hat{H}_D существуют только для уровней $t^{**} = F_{\pm}$ и даются формулой

$$\Delta E_{t^{**}, \pm} = \pm \frac{\gamma}{a\lambda^2} [C'_{t^{**}}(f_x h_y h_z + f_y h_x h_z + f_z h_x h_y) + D'_{t^{**}}(f_x^3 h_y h_z + f_y^3 h_x h_z + f_z^3 h_x h_y)]. \quad (17)$$

Для числовых констант были получены значения $C'_{F_{\pm}} = \mp 3/40$, $D'_{F_{\pm}} = \pm 1/8$. Примечательно, что выражение (17) не зависит от величины электрического поля F .

Поправка (17) линейна по магнитному полю, т. е. имеет смысл анизотропии g -фактора рассматриваемого уровня; она аналогична изученному в работе [8] эффекту анизотропии g -фактора электрона на уровне размерного квантования в асимметричной квантовой яме за счет взаимодействия \hat{H}_D .

Были выполнены численные оценки анизотропных поправок (13), (15) и (17) к зеемановскому расщеплению уровней донора для полупроводника GaAs, при этом были использованы следующие значения спин-орбитальных зонных параметров: $\eta = 6.5 \cdot 10^{-23}$ эВ·см²/Гс [22], $\gamma = 25$ эВ·Å³ [12]. Оценки показывают, что в электрических полях 200–1000 В/см и магнитных полях 0.5–1 Т вклад от взаимодействия \hat{H}_D в анизотропию спинового расщепления уровней $2p_{\pm 1}$, $3p_{\pm 1}$, $3d_{\pm 2}$ действительно бывает доминирующим в определенных интервалах полей, относящихся как к режиму “А”, так и к режиму “В”. Величина эффекта особенно велика для уровней $t = 3p_{\pm 1}$, так как для них $\Lambda_t \sim \Delta_2 \ll E_B$ (см. формулу (15)). Амплитуда анизотропии зеемановского расщепления этих уровней составляет порядка нескольких микроэлектронвольт, что является величиной, доступной для наблюдения с помощью экспериментальных методик типа использованных в работах [10, 11].

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предсказанный эффект открывает возможность определить спин-орбитальную константу γ полупроводника симметрии T_d на основе анализа данных экспериментов типа спинового и циклотронного резонансов электрона на доноре, а также экспериментов типа измерения временной динамики спина электрона на доноре методом «накачка–зондирование». Сильное электрическое поле может быть создано, например, внешним электрическим напряжением, прикладываемым к гетероструктуре или к барьеру Шотки. Достоинством предлагаемого метода измерения константы γ является тот факт, что наблюдаемая величина анизотропии спинового расщепления уровней зависит непосредственно от γ , а не от произведения γ на какие-либо релаксационные характеристики электрона, которые известны нечетко (последнее бывает, например, при определении γ из экспериментов по спиновой релаксации).

Автор горячо благодарит Н. С. Аверкиеву за советы и поддержку по ходу работы; А. П. Алексееву за чтение статьи и советы по улучшению стиля изложения; А. А. Грешнова за привлечение внимания автора к теме настоящей работы; а также А. В. Белолипецкого и М. М. Глазова за полезные обсуждения. Работа выполнена при поддержке правительства РФ (договор № 14.Z50.31.0021, ведущий ученый М. Х. Байер). Работа также поддержана грантом 12-02-31862 мол_а РФФИ и грантом фонда Династия.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Математические детали расчетов

Для расчета поправок к уровням энергии донора от спин-орбитального взаимодействия \hat{H}_g (7) при наличии магнитного поля и отсутствии электрического поля нужно использовать систему координат $x'y'z'$, в которой ось z' направлена вдоль магнитного поля. Оси x' и y' могут быть выбраны произвольно, в частности, можно выбрать ось x' в плоскости xy :

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -h_y/h_{\perp} & -h_x h_z/h_{\perp} & h_x \\ h_x/h_{\perp} & -h_y h_z/h_{\perp} & h_y \\ 0 & h_{\perp} & h_z \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix}, \quad (18)$$

где $h_{\perp} = \sqrt{h_x^2 + h_y^2}$. Аналогичная формула справедлива для компонент векторов \mathbf{K} и \mathbf{f} . В «магнитной» системе координат векторный потенциал (3) имеет вид

$$\mathbf{A}' = \frac{H}{2} \begin{pmatrix} -y' \\ x' \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (19)$$

в «кристаллической» системе координат —

$$\mathbf{A} = \frac{H}{2} \begin{pmatrix} h_y z - h_z y \\ -h_x z + h_z x \\ h_x y - h_y x \end{pmatrix}. \quad (20)$$

Для расчета выражения (12) необходимо знать средние значения $\langle \pm | \hat{\boldsymbol{\sigma}} | \pm \rangle$ и $\langle t | \hat{K}_i^2 | t \rangle$ (см. формулу (7)). Усреднение матриц Паули по спиновым состояниям $|\pm\rangle$ дается формулой

$$\langle \pm | \hat{\boldsymbol{\sigma}} | \pm \rangle = \pm \mathbf{h}. \quad (21)$$

Усреднение операторов \hat{K}_i^2 по состояниям $t = 1s, 2p_m, 3p_m$ проводится путем перехода от системы координат xyz к системе координат $x'y'z'$ по формуле (18), использования формулы (19) и усреднения операторов $(\tilde{x}')^2, (\tilde{z}')^2, \hat{k}_{x'}^2, \hat{k}_{z'}^2, \tilde{x}'\hat{k}_{y'}$ по волновым функциям атома водорода $|nl_m\rangle$, где m — проекция углового момента на ось z' . Подставляя рассчитанные таким путем средние значения $\langle \pm | \hat{\boldsymbol{\sigma}} | \pm \rangle$ и $\langle t | \hat{K}_i^2 | t \rangle$ в формулу (12), приходим к результату (13).

Для расчета поправок к уровням энергии донора от спин-орбитального взаимодействия \hat{H}_D (6) при наличии электрического поля в режиме «А» нужно также использовать систему координат $x'y'z'$. После подстановки (6), (20), (21) в формулу (14) в линейном порядке по \mathbf{A} получим

$$\Delta E_{t,\pm} = \pm \frac{\gamma}{\lambda^2} \{ [V_x h_y h_z + V_y h_x h_z + V_z h_x h_y] + [W_x h_x^2 + W_y h_y^2 + W_z h_z^2] \}. \quad (22)$$

Здесь величины $V_i = (V_t)_i$ и $W_i = (W_t)_i$ определены следующим образом:

$$V_i = \sum_{\alpha=1}^3 \langle t^* | \hat{Q}_{\alpha,i} | t^* \rangle, \quad (23)$$

$$W_i = \langle t^* | \hat{Q}_{4,i} | t^* \rangle,$$

где $|t^*\rangle$ — волновые функции (10), t^* соответствует t , операторы $\hat{Q}_{\alpha,i}$ происходят из оператора Дрессельхауза $\hat{H}_D(\hat{\mathbf{K}})$, линеаризованного по \mathbf{A} :

$$\begin{aligned} \hat{Q}_{1,i} &= -\hat{k}_i x_i \hat{k}_i, \\ \hat{Q}_{2,i} &= x_i (\hat{k}_{i+1}^2 + \hat{k}_{i+2}^2) / 2, \\ \hat{Q}_{3,i} &= \hat{k}_i (x_{i+1} \hat{k}_{i+1} + x_{i+2} \hat{k}_{i+2})_{symm} / 2, \\ \hat{Q}_{4,i} &= -\hat{k}_i (\hat{k}_{i+1} x_{i+2} + \hat{k}_{i+2} x_{i+1}). \end{aligned} \quad (24)$$

Величины V_i, W_i являются функциями электрического и магнитного полей. С учетом (10) для них получаем

$$V_i = 2eF \operatorname{Re} \sum_{\alpha=1}^3 \sum_{t' \neq t} \frac{\langle t | \hat{Q}_{\alpha,i} | t' \rangle \langle t' | \mathbf{f} \cdot \mathbf{r} | t \rangle}{E_t - E_{t'}}, \quad (25)$$

$$W_i = 2eF \operatorname{Re} \sum_{t' \neq t} \frac{\langle t | \hat{Q}_{4,i} | t' \rangle \langle t' | \mathbf{f} \cdot \mathbf{r} | t \rangle}{E_t - E_{t'}}.$$

Подчеркнем, что в этих формулах индекс $i = x, y, z$ относится к «кристаллической» системе координат, а состояния $|t, t'\rangle$ определены относительно оси z' «магнитной» системы координат $x'y'z'$.

Величины V_i и W_i в рамках преобразований группы T_d составляют, соответственно, полярный вектор (представление F_2) и представление $A_1 + E$; обе они линейны по вектору \mathbf{f} и не меняют знак при инверсии времени. Анализ входящих в (25) матричных элементов с помощью правил отбора теории групп показывает, что члены в суммах в формуле (25) равны нулю, когда один из уровней t или t' имеет симметрию s , и отличны от нуля, когда уровни t или t' относятся к парам термов $2p$ и $3d, 3p$ и $3d$, а также к парам термов с более высокими l (и n). С помощью теории характеров было показано, что при учете членов с t и t' из термов симметрии p и d каждая из величин V_i и W_i содержит не более двух независимых инвариантов группы T_d от векторов \mathbf{h} и \mathbf{f} .

С другой стороны, результирующая поправка к энергии (14) должна быть полиномом от векторов \mathbf{h} и \mathbf{f} , линейным по \mathbf{f} и четвертой степени по \mathbf{h} (последнее можно увидеть из анализа формул (10), (14) и (18)). Коэффициенты, входящие в разложение результирующей поправки к энергии $\Delta E_{t,\pm}(\mathbf{f}, \mathbf{h})$ по f_i и h_i , составляют тензор, полярный по одному индексу, аксиальный по остальным четырем индексам и симметричный по перестановкам последних четырех индексов. Теория характеров показывает, что в группе T_d существуют два таких линейно независимых тензора. Поэтому искомая функция $\Delta E_{t,\pm}(\mathbf{f}, \mathbf{h})$ содержит два анизотропных инварианта группы T_d и, соответственно, две константы. На основе этого вывода, тождества $h_x^2 + h_y^2 + h_z^2 \equiv 1$ и координатной записи преобразований группы T_d в системе координат xyz было показано, что искомая зависимость записывается в виде (15).

Был проведен прямой компьютерный аналитический расчет величины $\Delta E_{t,\pm}$ на основе формул (18)–(25). Было показано, что после соответствующих преобразований зависимость $\Delta E_{t,\pm}(\mathbf{f}, \mathbf{h})$ действительно можно представить в виде (15). Кроме того, в процессе расчета были получены для некоторых уровней точные значения численных коэффициентов C_t, D_t в формуле (15); эти значения приведены в основном тексте статьи.

Для расчета поправок к уровням донора от взаимодействия \hat{H}_D при наличии электрического поля в режиме “В” нужно использовать систему координат $x^*y^*z^*$, в которой ось z^* выбрана вдоль электрического поля:

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -f_y/f_\perp & -f_x f_z/f_\perp & f_x \\ f_x/f_\perp & -f_y f_z/f_\perp & f_y \\ 0 & f_\perp & f_z \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} x^* \\ y^* \\ z^* \end{pmatrix}, \quad (26)$$

где $f_\perp = \sqrt{f_x^2 + f_y^2}$. Преобразования компонент векторов \mathbf{K} и \mathbf{h} осуществляются по формуле, аналогичной (26). Для поправок (16) за счет \hat{H}_D будут справедливы выражения (22), (23) и (24) с заменой в (23) усреднения по состоянию t^* с волновой функцией (10) на усреднение по штарковским состояниям $t^{**} = 1s, F_0, F_\pm$. Напомним, что осью квантования спина, как и в режиме “А”, мы считаем направление \mathbf{h} . Соответствующие величины $V_i = (V_{t^{**}})_i$ и $W_i = (W_{t^{**}})_i$ отличны от нуля только для состояний $t^{**} = F_\pm$, так как только состояния F_\pm обладают асимметрией вдоль оси z^* .

Был проведен симметричный анализ величин V_i и W_i , аналогичный описанному выше анализу для режима “А”. На его основе для поправки к энергии (16) было получено выражение (17), которое представляет собой полином кубической симметрии, квадратичный по аксиальному вектору \mathbf{h} и кубичный по полярному вектору \mathbf{f} . С помощью компьютерного расчета для уровней F_\pm были получены точные значения численных коэффициентов $C'_{t^{**}}$ и $D'_{t^{**}}$ в формуле (17); они приведены в основном тексте статьи.

Для уровней $1s$ и F_0 поправки к уровням энергии от спин-орбитального взаимодействия \hat{H}_D (6) в режиме “В” возникают только в следующих порядках по электрическому полю.

ЛИТЕРАТУРА

1. Р. П. Сейсян, *Окно в микромир*, вып. 2 (6), 6 (2006).

2. L. E. Calvet, R. G. Wheeler, and M. A. Reed, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 096805 (2007).

3. C. Bulutay, M. Kulakci, and R. Turan, *Phys. Rev. B* **81**, 125333 (2010); M. Kulakci, U. Serincan, R. Turan, and T. G. Finstad, *Nanotechnology* **19**, 455403 (2008).

4. G. D. Smit, S. Rogge, J. Caro, and T. M. Klapwijk, *Phys. Rev. B* **70**, 035206 (2004).

5. M. Friesen, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 186403 (2005).

6. S. Ritter, P. Gartner, N. Baer, and F. Jahnke, *Phys. Rev. B* **76**, 165302 (2007); A. Debernardi and M. Fanciulli, *Phys. Rev. B* **81**, 195302 (2010).

7. В. Г. Голубев, В. И. Иванов-Омский, А. В. Осутин, Д. Г. Поляков, *ФТП* **21**, 30 (1987).

8. В. К. Калевич, В. Л. Коренев, *Письма в ЖЭТФ* **57**, 557 (1993).

9. P. S. Eldrige, J. Hubner, S. Oertel et al., *Phys. Rev. B* **83**, 041301 (2011).

10. Yu. A. Nefyodov, A. V. Shchepetilnikov, I. V. Kukushkin, W. Dietsche, and S. Schmult, *Phys. Rev. B* **83**, 041307 (2011).

11. M. P. Walser et al., *Phys. Rev. B* **86**, 195309 (2012).

12. J.-M. Jancu, R. Scholz, E. A. de Andrada e Silva, and G. C. La Rocca, *Phys. Rev. B* **72**, 193201 (2005).

13. Ж. А. Девизорова, В. А. Волков, *Письма в ЖЭТФ* **98**, 110 (2013).

14. П. С. Алексеев, *Письма в ЖЭТФ* **98**, 92 (2013).

15. П. С. Алексеев, М. В. Якунин, И. Н. Ясиевич, *ФТП* **41**, 1110 (2007).

16. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика. Нерелятивистская теория*, Наука, Москва (1989).

17. В. Б. Берестецкий, Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Квантовая электродинамика*, Наука, Москва (1989).

18. N. S. Averkiev, V. G. Golubev, and A. A. Dukin, *Phys. Stat. Sol. (b)* **210**, 885 (1998).

19. A. V. Klarenbosch, T. O. Klaassen, W. T. Wenckebach, and C. T. Foxon, *J. Appl. Phys.* **67**, 6323 (1990).

20. Б. М. Карнаков, В. С. Попов, *ЖЭТФ* **124**, 996 (2003).

21. П. С. Алексеев, *ФТП* **47**, 1253 (2013).

22. П. С. Алексеев, *Письма в ЖЭТФ* **90**, 111 (2009).