

УДК 537.311.33.539.211

©1993

ПРОИСХОЖДЕНИЕ ЛИНЕЙНЫХ ЧЛЕНОВ В КВАЗИДВУМЕРНОМ ЗАКОНЕ ДИСПЕРСИИ

Д. А. Романов

Предложена модификация метода эффективной массы для случая внешнего потенциала, слабого в сравнении с кристаллическим, но резко меняющегося на расстояниях порядка постоянной решетки. На основе этого метода получено выражение для ненулевой спин-орбитальной добавки к энергии электронных подзон в квазидвумерных слоях. Найденная численная оценка коэффициента в соответствующем линейном члене закона дисперсии близка к экспериментальным значениям.

Как известно, в несимметричных квазидвумерных системах в законе дисперсии электронов возможно появление дополнительных членов, линейно зависящих от величины двумерного импульса [1-3]. Действительно, если электроны зажаты в плоскости своего движения (x, y) несимметричным потенциалом $v(z) \neq v(-z)$, то физически выделенное направление нормали n позволяет сконструировать добавку к гамильтониану

$$\Delta \hat{H} = \chi [\hat{\sigma} \times \mathbf{n}] \mathbf{q}, \quad (1)$$

где $\hat{\sigma}_i$ — матрицы Паули, \mathbf{q} — двумерный волновой вектор. Линейность $\Delta \hat{H}$ по \mathbf{q} приводит к существованию так называемой петли экстремумов, заметной перестройке спектра в магнитном поле и наличию ряда наблюдаемых эффектов, позволяющих оценить величину константы χ [4].

Вид поправки (1) делает естественным предположение о ее происхождении из спин-орбитального взаимодействия в потенциале $v(z)$

$$\hat{H}_{SO} = \alpha [\hat{\sigma} \times \nabla v] \hat{p}, \quad (2)$$

где α — спин-орбитальная константа. Если, однако, поперечное квантование электрона описывается в приближении эффективной массы (m^*) гамильтонианом

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m^*} + v(z), \quad (3)$$

то поправка к энергии N -й подзоны, получаемая из \hat{H}_{SO} в первом порядке теории возмущений, равна

$$\Delta \varepsilon \propto \langle N | \nabla v | N \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle N | \left[\hat{p}_z, \hat{H}_0 \right] | N \rangle \equiv 0. \quad (4)$$

Поэтому вклад спин-орбитального взаимодействия (2) в двумерный закон дисперсии может начаться только с квадратичных по q членов.

Таким образом, происхождение добавки (1) должно лежать за границами обычного приближения эффективной массы. В использованных рецептах ее получения эксплуатируются феноменологические граничные условия [5] либо исходное отсутствие центра инверсии у кристалла [6].

Целью настоящей работы является получение добавки (1) за счет отклонения гамильтониана электрона от вида (3) в условиях достаточно резкого (в сравнении с кристаллической структурой) потенциала $v(z)$.

1. Модифицированный гамильтониан эффективной массы

Рассмотрим электрон с «голой» массой m , движущийся под действием периодического кристаллического потенциала $v_c(\mathbf{r})$ и внешнего потенциала $v(\mathbf{r})$. Величина последнего предполагается малой (в сравнении с амплитудой $v_c(\mathbf{r})$), однако он может быть достаточно резким, т.е. существенно меняться на длине постоянной решетки a . Такие модельные условия позволяют, как будет видно в дальнейшем, сохранить адекватность описания в невозмущенном блоховском базисе, учитывая в то же время эффекты, лежащие за рамками стандартного приближения огибающих волновых функций.

Ограничиваясь одночастичным подходом, решения описывающего движения электрона уравнения Шредингера

$$\left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + v_c(\mathbf{r}) + v(\mathbf{r}) + \alpha [\hat{\boldsymbol{\sigma}} \times \nabla v_c] \hat{\mathbf{p}} + \alpha [\hat{\boldsymbol{\sigma}} \times \nabla v] \hat{\mathbf{p}} \right) \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r}) \quad (5)$$

будем искать в виде разложения по базисным функциям Кона-Латтинджера [7]

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} \sum_{n'} c_{n'\mathbf{k}} \left| n'\mathbf{k} \right\rangle, \quad \left| n'\mathbf{k} \right\rangle = V^{1/2} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} u_{n'}(\mathbf{r}). \quad (6)$$

Здесь V — объем кристалла, n' — номер энергетической зоны, $\hbar\mathbf{k}$ — квазиимпульс, $u_{n'}(\mathbf{r})$ — блоховские амплитуды при $k = 0$ (для простоты и определенности рассматривается невырожденный однодолинный случай, когда эта точка соответствует минимуму интересующей нас зоны n), удовлетворяющие уравнениям

$$\left(\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + v_c(\mathbf{r}) + \alpha [\hat{\boldsymbol{\sigma}} \times \nabla v_c] \hat{\mathbf{p}} \right) u_{n'}(\mathbf{r}) = E_n u_{n'}(\mathbf{r}). \quad (7)$$

Подчеркнем, что в (6) и всюду в дальнейшем (где это окажется существенным) под $\sum_{\mathbf{k}}$ подразумевается суммирование по зоне Бриллюэна. Для получения «однозонного» уравнения последуем стандартному рецепту [7,8]. Разделим матричные элементы гамильтониана в (5) $\langle n\mathbf{k} | \hat{H} | n'\mathbf{k}' \rangle$

на диагональную и недиагональную по номеру зоны части. Затем, проводя каноническое преобразование, которое переводит последнюю в дополнительные диагональные члены, представляющие собой ряд по степеням k [9], ограничимся квадратичными членами этого ряда. (Учет следующих членов не привел бы к принципиальным изменениям дальнейшего изложения, но существенно усложнил бы полученные формулы). Фактически основанием для такого обрезания служит малость параметров $\hbar k/\pi^{nn'}$, где

$$\pi^{nn'} = \langle n0 | (\hat{\mathbf{p}} + m\alpha[\hat{\boldsymbol{\sigma}} \times \nabla v_c]) | n'0 \rangle. \quad (8)$$

Заметим, однако, что такая малость еще не означает, вообще говоря, требования $ka \ll 1$. Поэтому принятое ограничение не препятствует наличию заметной доли компонент C_{nk} с $k \sim 1/a$.

Введем далее огибающую волновую функцию

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} c_{nk} \quad (9)$$

(ее зонный индекс n в дальнейшем опускается).

С учетом малости матричных элементов $v(\mathbf{r})$ в сравнении с межзонными энергетическими расстояниями она определится в главном приближении интегриродифференциальным уравнением

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta \Psi + \int d^3 r' f(\mathbf{r} - \mathbf{r}') v(\mathbf{r}') |u_n(\mathbf{r}')|^2 \Psi(\mathbf{r}') + \alpha \int d^3 r' K_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \Psi(\mathbf{r}') = (E - E_n) \Psi(\mathbf{r}), \quad (10)$$

в котором ядро $K_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ имеет следующую громоздкую форму:

$$K_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \int d^3 r'' f(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') u_n^*(\mathbf{r}'') [\hat{\boldsymbol{\sigma}} \times \nabla v] (\hat{\mathbf{p}} u_n(\mathbf{r}'') + i\hbar u_n(\mathbf{r}'') \nabla_{\mathbf{r}'}) f(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}') + \frac{i\hbar}{m} \sum_{n'} (E_n - E_{n'})^{-1} \int d^3 r'' \left\{ (u_n^* [\hat{\boldsymbol{\sigma}} \times \nabla v] \hat{\mathbf{p}} u_{n'}) (\pi^{n'n} \nabla_{\mathbf{r}'}) - (u_{n'}^* [\hat{\boldsymbol{\sigma}} \times \nabla v] \hat{\mathbf{p}} u_n) (\pi^{n'n'} \nabla_{\mathbf{r}}) \right\} f(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') f(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'). \quad (11)$$

Степень нелокальности уравнения (11) определяется входящей в него функцией

$$f(\mathbf{r}) = V^{-1} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (12)$$

Заметим, что $f(\mathbf{r})$ играет роль δ -функции в классе функций (9), определяемых Фурье-компонентами только в ограниченной области обратного пространства. Для эффективного выполнения $f(\mathbf{r})$ своих сглаживающих функций существенно, чтобы характерная длина ее убывания была бы не меньше периода осцилляций $|u_n(\mathbf{r})|^2$. Для достаточно больших n это условие выполняется с большим запасом. Фактически это тот же запас по параметру $\pi^{nn'} a/\hbar$, о котором говорилось в замечании после формулы (8). Кроме того, можно отметить, что при достаточно плавном потенциале $v(\mathbf{r})$, можем быть вынесенным за знак интеграла в (11), это уравнение превращается (при $\alpha = 0$) в обычное уравнение Шредингера стандартного приближения эффективной массы.

3. Спин-орбитальные поправки в инверсионном канале

Рассмотрим теперь применение подхода, изложенного в предыдущем разделе, к конкретной ситуации инверсионного канала вблизи сингулярной грани кубического полупроводникового кристалла. Направим ось z декартовой системы координат в глубину кристалла, а оси x, y — по кристаллическим осям на поверхности. В этом случае $v(\mathbf{r}) = v(z)$, что позволяет искать решение уравнения (11) в виде

$$\psi(\mathbf{r}) = \varphi(z)e^{iq_x x + iq_y y} \quad (13)$$

(в дальнейшем для простоты будем считать $q_y = 0$ и опускать индекс y q_x). Кроме того, поскольку $\alpha \ll 1$, нам будет достаточно учесть влияние $K_\alpha(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ в первом порядке теории возмущений.

В нулевом приближении поперечная волновая функция определится уравнением

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 \varphi}{dz^2} + \int dz' f(z-z')v(z')\varphi(z')U(z') = \varepsilon \varphi(z). \quad (14)$$

Здесь

$$U(z) = \frac{1}{\Omega} \int dx dy |u_n(\mathbf{r})|^2 \quad (15)$$

(Ω — проекция элементарной ячейки кристалла на плоскость (x, y)), $\varepsilon = E - E_n - \hbar^2 q^2 / 2m^*$, а $f(z-z')$ дается одномерным аналогом (12). Спин-орбитальная поправка получается в виде

$$\Delta \varepsilon = \alpha \hbar q \sigma_y \left\{ - \left(1 + \frac{2}{m} \operatorname{Re} \left(\sum'_{n'} (E_n - E_{n'})^{-1} \pi_x^{nn'} p_x^{n'n} \right) \right) \int dz v(z) |\varphi(z)|^2 \frac{dU}{dz} + \right. \\ \left. + \frac{2}{m} \int dz \frac{dv}{dz} |\varphi(z)|^2 \operatorname{Re} \left(\sum'_{n'} (E_n - E_{n'})^{-1} \pi_x^{nn'} \left(P_x^{n'n}(z) - p_x^{n'n} U(z) \right) \right) \right\}, \quad (16)$$

где в свою очередь

$$P_x^{nn'}(z) = \frac{1}{\Omega} \int dx dy u_n^* \hat{p}_x u_{n'}. \quad (17)$$

Нетрудно убедиться, что $\Delta \varepsilon \neq 0$ именно вследствие учета «мелкозернистой структуры» в (14). Действительно, при плавном потенциале $v(z)$ интегралы в (16) будут экспоненциально малы из-за быстроосциллирующего характера (при нулевом среднем значении) функций dU/dz и $P_x^{n'n}(z) - p_x^{n'n} U(z)$.

Для иллюстрации сказанного рассмотрим простую модельную ситуацию. Пусть одномерный локализирующий потенциал представлен в виде двух встречных ступеней

$$v(z) = v_0 \left(\operatorname{th} \left(\frac{z-L}{l_2} \right) - \operatorname{th} \left(\frac{z}{l_1} \right) \right) \quad (18)$$

($l_i \ll L$), а функция $U(z)$ в (15) представлена простейшей периодической зависимостью

$$U(z) = \frac{2}{a} \cos^2 \left(2\pi n \frac{z}{a} + \delta \right), \quad (19)$$

причем $a \ll L$. Тогда в условиях заметного подбарьерного проникновения ($v_0 \sim \hbar^2/mL^2$) формула (16) дает

$$\Delta \varepsilon \propto \frac{v_0 a^2}{L} \left(\frac{nl_1 \cos(2\delta)}{a \operatorname{sh}(nl_1/a)} - \frac{nl_2 \cos(2\delta + 4\pi nL/a)}{a \operatorname{sh}(nl_2/a)} \right). \quad (20)$$

Каждый из членов в скобках монотонно убывает с ростом соответствующего параметра nl_i/a , становясь экспоненциально малым при $(nl_i/a) \rightarrow \infty$. Поэтому можно указать два типа условий, благоприятствующих проявлению линейных членов в законе дисперсии: а) $l_1 \sim a$, $l_2 \gg l_1$ (или наоборот); б) $l_1 \sim l_2 \sim a$, $4nL/a = 2N + 1$ — нечетному целому числу. При этом случай а) — «макроскопическая» неэквивалентность границ, — по-видимому, реализуется в инверсионных каналах, а случай в) — «микроскопическая» неэквивалентность — в квантовых ямах в гетероструктурах на основе материалов со сложной элементарной ячейкой.

Выражение (16) связывает добавку $\Delta \varepsilon$ с характеристиками кристалла, что позволяет грубо оценить величину константы χ в линейном дисперсионном члене (1). Будем считать, что $\Delta \varepsilon$ определяется наличием в потенциале $v(z)$ одного резкого граничного участка с размерами $\sim a$ (на котором $v(z) \sim v_0$). Для электронных состояний, квантованных в таком инверсионном канале, плотность вероятности $|\varphi|^2 \sim L^{-1}$, где L — характерная ширина канала. Тогда, учитывая, что $|dU/dz| \sim n/a$, получим следующую оценку:

$$\chi \sim \alpha \hbar v_0 \frac{n}{a} \frac{m}{m^*} \frac{a}{L} \sim \varepsilon_{SO} \frac{v_0}{v_c} \frac{m}{m^*} \frac{a^2}{L}, \quad (21)$$

где ε_{SO} — характерная величина кристаллического спин-орбитального расщепления. В частности, для кремния, полагая $\varepsilon_{SO} \approx 0.045$ эВ, $v_0/v_c \sim 0.1$, $a/L \sim 0.1$, находим численное значение $\chi \sim 2 \cdot 10^{-10}$ эВ · см, что близко к экспериментальным оценкам [4].

В заключение отметим, что развитый здесь модифицированный метод эффективной массы может быть применен в качестве основы для рассмотрения и других эффектов, связанных с «тонкими» проявлениями кристаллической решетки: V_g -осцилляций энергии уровней в инверсионных каналах [10], высокоэнергетической структуры магнитных поверхностных уровней и т.п.

Автору приятно поблагодарить В.И.Белиничера, М.В.Энтина и Ю.Б.Лянда-Геллера за полезное обсуждение.

Список литературы

- [1] Васько Ф.Т. // Письма в ЖЭТФ. 1979. Т. 30. № 9. С. 574-577.
- [2] Бычков Ю.А., Рашба Э.И. // Письма в ЖЭТФ. 1984. Т. 39. № 2. С. 66-69.
- [3] Васько Ф.Т., Прима Н.А. // ФТТ. 1983. Т. 25. № 2. С. 582-584.
- [4] Бычков Ю.А., Рашба Э.И. // УФН. 1985. Т. 146. № 3. С. 531-534.

- [5] Васько Ф.Т. // ФТТ. 1985. Т. 19. № 11. С. 1958–1963.
- [6] Дьяконов М.И., Кочаровский В.Ю. // ФТТ. 1986. Т. 20. № 1. С. 178–181.
- [7] Латтинджер Дж., Кон В. // Сб. «Проблемы физики полупроводников» / Под ред. В.Л.Бонч-Бруевича. М.: ИЛ, 1957. С. 515–539.
- [8] Цидильковский И.М. Зонная структура полупроводников. М.: Наука, 1978. С. 118.
- [9] Бир Г.Л., Пикус Г.Е. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М.: Наука, 1972. С. 584.
- [10] Романов Д.А. // Всесоюзная школа по физике поверхности (Карпаты, 1986 г.). Черногоровка, 1986. С. 85.

Институт физики полупроводников СО РАН
Новосибирск

Поступило в Редакцию
28 апреля 1992 г.
В окончательной редакции
22 сентября 1992 г.

