

# Локализованные в наноструктурах дырки во внешнем магнитном поле: $g$ -фактор и смешивание состояний

© М.А. Семина, Р.А. Сурис<sup>†</sup>

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

(Получена 9 декабря 2014 г. Принята к печати 19 декабря 2014 г.)

Теоретически исследованы энергетический спектр и волновые функции дырок в валентной зоне в полупроводниковых наносистемах — квантовых ямах, проволоках и точках — в присутствии внешнего магнитного поля. Прослежена зависимость зеемановского расщепления основного состояния дырки при изменении параметров размерного квантования с учетом сложной структуры валентной зоны и магнитоиндуцированного смешивания дырочных состояний. Приведены аналитические формулы, описывающие эффект Зеемана в валентной зоне в предельных случаях квантового диска, сферически-симметричной квантовой точки и квантовой проволоки. Показано, что величина  $g$ -фактора дырки крайне чувствительна к составу дырочного состояния (тяжелая или легкая дырка), а следовательно, к геометрии потенциала размерного квантования.

## 1. Введение

Последнее десятилетие отмечено бурным ростом интереса к исследованию спин-зависимых эффектов в полупроводниковых наноструктурах [1]. Благодаря понижению симметрии системы при переходе от объемных материалов к низкоразмерным системам спин-зависимые эффекты усиливаются, что открывает перспективы создания приборов, использующих не только заряд электрона или дырки, но и их спин.

Отклик спина на внешнее магнитное поле определяется  $g$ -фактором, или множителем Ланде. В полупроводниках за счет параметрически сильного спин-орбитального взаимодействия этот важнейший параметр существенно отличается от  $g$ -фактора свободного электрона, равного 2 [2]. Например, для электронов в зоне проводимости объемного GaAs величина эффективного  $g$ -фактора составляет  $g \approx -0.44$ , а для InAs  $g \approx -15$ . В наноструктурах размерное квантование приводит к дополнительной перенормировке множителя Ланде, а также к возникновению анизотропии спинового расщепления энергии электронов в магнитном поле [3–6]. Основные механизмы перенормировки  $g$ -фактора зоны проводимости хорошо известны, а имеющиеся теоретические расчеты количественно описывают данные эксперимента [6].

Более сложная ситуация имеет место для дырок в валентной зоне. Хорошо известно, что в объемных материалах типа GaAs состояния вершины валентной зоны четырехкратно вырождены. При этом отклик дырок на магнитное поле описывается двумя параметрами —  $\kappa$  и  $q$  (магнитные параметры Латтинжера), и он качественно отличается от отклика электронов [7]. Более того, даже слабый внешний потенциал, например, кулоновский потенциал мелкого акцептора, приводит к существенной перенормировке спиновых расщеплений дырки [8].

Размерное квантование также приводит к качественной перестройке структуры дырочных состояний. Напри-

мер, при переходе от объемного материала к квантовой яме формируются подзоны тяжелых и легких дырок, величины спиновых расщеплений которых значительно отличаются от их значений в объемном полупроводнике [9–11]. Подобная ситуация имеет место и в нанокристаллах с формой, близкой к сферической [12,13], а также в самоорганизованных квантовых точках [14]. К настоящему времени установлено, что все эти эффекты обусловлены именно сложной структурой валентной зоны. Несмотря на то что ряд теоретических расчетов находится в согласии с имеющимися экспериментальными данными [10,15–17], детального исследования взаимосвязи структуры валентной зоны и значений  $g$ -факторов для дырок не предпринималось. Цель данной работы состоит в выполнении таких исследований.

Далее рассчитаны спиновые расщепления дырочных состояний в магнитном поле в структурах с квантовыми точками с произвольным соотношением между протяженностями вдоль осей координат. Для описания дырочных состояний используется гамильтониан Латтинжера, а для описания эффектов размерного квантования — модель параболического потенциала квантовой точки. Отметим, что непрерывное изменение параметров потенциала квантовой точки приводит к плавному изменению геометрии структуры, позволяя проследить переход между предельными случаями квантовой ямы, сферически-симметричной квантовой точки и квантовой проволоки. При этом происходят изменение структуры основного дырочного состояния и, как показывает анализ, существенные изменения величины  $g$ -факторов. Полученные результаты имеют общий характер, так как и структура дырочных состояний, и  $g$ -фактор главным образом определяются геометрией системы.

## 2. Модель и методы

Сформулируем используемую в работе модель квантовой точки и методы расчетов энергетического спектра и  $g$ -фактора дырки. Состояния дырки в наноструктуре

<sup>†</sup> E-mail: suris@theory.ioffe.ru

мы описываем в рамках сферического приближения для гамильтониана Латтинжера [7]:

$$\hat{H}_L = \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[ \left( \gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma \right) k^2 - 2\gamma(\mathbf{k}\mathbf{J})^2 \right] + V_{\text{ext}}(\mathbf{r}), \quad (1)$$

где  $\mathbf{r}$  — радиус-вектор дырки,  $\gamma_1, \gamma \equiv \gamma_2 = \gamma_3$  — параметры Латтинжера,  $\mathbf{J}$  — псевдовектор, составленный из матриц оператора углового момента  $3/2$ ,  $\mathbf{k}$  — оператор волнового вектора дырки,  $\mathbf{k} = i\partial/\partial\mathbf{r}$ ,  $m_0$  — масса свободного электрона. В гамильтониане (1)  $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$  — параболический потенциал квантовой точки:

$$V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) = A_x x^2 + A_y y^2 + A_z z^2, \quad (2)$$

$A_x, A_y, A_z$  — жесткости потенциала вдоль кубических осей  $x \parallel [100]$ ,  $y \parallel [010]$ ,  $z \parallel [001]$ . Отметим, что в рассматриваемом сферическом приближении привязка осей координат к кристаллографическим направлениям может быть в общем случае произвольной. Параметры Латтинжера внутри квантовой точки и вне ее считаются одинаковыми. Учет гофрировки валентной зоны ( $\gamma_2 \neq \gamma_3$ ), как будет показано далее в разд. 3, приводит к некоторому количественному изменению результатов, но качественный вид полученных результатов сохранится.

Выбор параболического потенциала в качестве модельного обусловлен, с одной стороны, физической разумностью такого потенциала, поскольку любой гладкий потенциал вблизи минимума может быть аппроксимирован параболическим, а с другой, тем обстоятельством, что использование параболического потенциала значительно облегчает техническую сторону расчетов. Кроме того, параболический потенциал широко используется для описания эффектов размерного квантования в полупроводниковых квантовых точках [13,18–20].

В присутствии внешнего постоянного магнитного поля  $\mathbf{B}$  гамильтониан дырки (1), во-первых, приобретает дополнительный вклад [2,7]

$$\hat{H}_Z = -2\mu_B \chi(\mathbf{J}\mathbf{B}), \quad (3)$$

где  $\mu_B$  — магнетон Бора,  $\chi$  — магнитная константа Латтинжера, а во-вторых, в (1) оператор  $\mathbf{k}$  заменяется на  $\mathbf{k} - (e/c)\mathbf{A}$ , где  $\mathbf{A}$  — векторный потенциал приложенного магнитного поля. Здесь и далее используется дырочное представление, где  $\gamma_1, \gamma > 0$ ,  $e = |e|$  — элементарный заряд. Анизотропный вклад в эффект Зеемана  $\propto q(B_x J_x^2 + B_y J_y^3 + B_z J_z^3)$ , описываемый параметром  $q$ , в большинстве структур мал по сравнению с изотропным (3) [21], поэтому мы им пренебрегаем. Случаи, когда анизотропный вклад может играть главную роль, будут рассмотрены отдельно.

Пусть магнитное поле  $B$  направлено вдоль оси  $z$ ; напомним, что при использовании сферического приближения для гамильтониана Латтинжера это не приводит к ограничению общности полученных результатов, и векторный потенциал выбран в калибровке Ландау,  $\mathbf{A} = (0, Bx, 0)$ . В качестве единиц измерения энергии и длины выберем эффективные Ридберг,

$Ry^* = m_{hh}e^4/2\varepsilon^2\hbar^2$ , и боровский радиус,  $a_B^* = \hbar^2\varepsilon/m_{hh}e^2$ , определяемые эффективной массой тяжелой дырки  $m_{hh} = m_0/(\gamma_1 - 2\gamma)$ .

В безразмерных единицах гамильтониан дырки принимает следующий вид:

$$\hat{H}_h = \frac{2\gamma_1 + 5\gamma}{2(\gamma_1 - 2\gamma)} k^2 - \frac{2\gamma}{\gamma_1 - 2\gamma} (\mathbf{k}\mathbf{J})^2 - \tilde{V}_{\text{ext}}(\mathbf{r}) + \hat{H}_Z + \hat{H}_B. \quad (4)$$

Здесь  $V_{\text{ext}}(\mathbf{r}) = \tilde{A}_x x^2 + \tilde{A}_y y^2 + \tilde{A}_z z^2$ ,  $\tilde{A}_{x,y,z}$  — безразмерные жесткости потенциала квантовой точки,  $\hat{H}_Z = -[2\chi/(\gamma_1 - 2\gamma)]\tilde{B}J_z$  — безразмерный гамильтониан (3),  $\hat{H}_B$  — безразмерный гамильтониан, описывающий орбитальный эффект магнитного поля:

$$\begin{aligned} \hat{H}_B = & \frac{2\gamma_1 + 5\gamma}{2(\gamma_1 - 2\gamma)} (-2\tilde{B}xk_y + \tilde{B}^2x^2) \\ & + \frac{2\gamma}{\gamma_1 - 2\gamma} \left[ J_y^2 (2\tilde{B}xk_y - \tilde{B}^2x^2) + (J_y J_z + J_z J_y) \tilde{B}xk_z \right. \\ & \left. + (J_y J_x + J_x J_y) \left( \tilde{B}xk_x - \frac{i\tilde{B}}{2} \right) \right], \quad (5) \end{aligned}$$

где  $\tilde{B} = (ea_B^2/c\hbar)B$  — безразмерное магнитное поле.

Отметим, что выбор единиц для измерения длины и энергии не влияет на техническую сторону численного расчета (описанный ниже метод эффективно сходится при любых физически разумных геометрических размерах структуры), поэтому нами были выбраны боровские единицы. При таком выборе и магнитное поле, и жесткости потенциала квантовой точки входят в уравнение Шредингера в виде независимых параметров. Напротив, если выбрать в качестве единиц измерения магнитную длину и энергию первого уровня Ландау, то в безразмерном уравнении Шредингера не будет присутствовать в явном виде величина магнитного поля, что снизит наглядность полученных результатов.

Для расчета энергетического спектра дырки в магнитном поле проводилась диагонализация матрицы гамильтониана (4), вычисленной на базе

$$\begin{aligned} \Psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) = & \psi_{n_x}(x) \chi_{n_y}(y) \phi_{n_z}(z), \\ n_x, n_y, n_z = & 1 \dots N, \quad (6) \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} \psi_{n_x}(x) = & \frac{1}{\sqrt{2^{n_x} n_x!}} \left( \frac{1}{\pi \tilde{l}_x^2} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{x^2}{2\tilde{l}_x^2}\right) H_{n_x}\left(\frac{x}{\tilde{l}_x}\right), \\ \chi_{n_y}(y) = & \frac{1}{\sqrt{2^{n_y} n_y!}} \left( \frac{1}{\pi \tilde{l}_y^2} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{y^2}{2\tilde{l}_y^2}\right) H_{n_y}\left(\frac{y}{\tilde{l}_y}\right), \\ \phi_{n_z}(z) = & \frac{1}{\sqrt{2^{n_z} n_z!}} \left( \frac{1}{\pi \tilde{l}_z^2} \right)^{1/4} \exp\left(-\frac{z^2}{2\tilde{l}_z^2}\right) H_{n_z}\left(\frac{z}{\tilde{l}_z}\right) \end{aligned}$$

— собственные функции линейного гармонического осциллятора с характерными длинами  $\tilde{l}_x = [(\gamma_1 + \gamma)/(\gamma_1 - 2\gamma)\tilde{A}_x]^{1/4}$ ,  $\tilde{l}_y = [(\gamma_1 + \gamma)/(\gamma_1 - 2\gamma)\tilde{A}_y]^{1/4}$ ,  $\tilde{l}_z = \tilde{A}_z^{-1/4}$ ,

$H_n(x)$  — полиномы Эрмита [22]. Такой базис соответствует собственным функциям дырки, сформированной блоховскими состояниями с проекцией момента  $j_z = \pm 3/2$  на направление приложенного магнитного поля. Для проверки сходимости численного расчета использовался также дополнительный базис, соответствующий дыркам с блоховскими амплитудами, характеризующимися  $j_z = \pm 1/2$ , где характерные длины вводятся согласно  $\tilde{l}'_x = [(\gamma_1 - \gamma)/(\gamma_1 - 2\gamma)\tilde{A}_x]^{1/4}$ ,  $\tilde{l}'_y = [(\gamma_1 - \gamma)/(\gamma_1 - 2\gamma)\tilde{A}_y]^{1/4}$  и  $\tilde{l}'_z = [(\gamma_1 + 2\gamma)/(\gamma_1 - 2\gamma)\tilde{A}_y]^{1/4}$  соответственно.

Далее представлены результаты расчетов энергетического спектра дырки в квантовых точках в зависимости от величины приложенного магнитного поля и проанализирована зависимость  $g$ -фактора основного состояния дырки от геометрии потенциала, описываемой соотношением констант  $\tilde{A}_x$ ,  $\tilde{A}_y$  и  $\tilde{A}_z$ .

### 3. Результаты и обсуждение

#### 3.1. Уровни размерного квантования

В данном разделе исследуется влияние магнитного поля на структуру энергетических уровней дырки в квантовых точках различной формы. Введем характерный размер квантовой точки вдоль оси  $i$  ( $i = x, y, z$ ) как

$$L_i = \frac{1}{\sqrt[4]{\tilde{A}_i}}. \quad (7)$$

При этом для сферически-симметричной квантовой точки  $L_x = L_y = L_z$ , для квантового диска  $L_z \ll L_x, L_y$ , для квантовой проволоки  $L_z \gg L_x, L_y$ . Магнитное поле характеризуется магнитной длиной, введенной выше согласно  $L_B = 1/\sqrt{B}$ .

На рис. 1 представлены зависимости энергий  $E$  нескольких первых уровней размерного квантования дырки в аксиально-симметричных наноструктурах различной геометрии, в которых  $L_x = L_y$ , а  $L_z$  произвольно, от квадрата отношения  $(L_{\perp,||}^i/L_B)^2 \propto \tilde{B}$ , где  $L_{\perp,||}^i$  — характерная длина локализации тяжелой ( $i = hh$ ) или легкой ( $i = lh$ ) дырки в перпендикулярном или параллельном плоскости структуры направлении:  $L_{\perp}^{hh,lh} = \{(\gamma_1 \mp 2\gamma)/[(\gamma_1 - 2\gamma)\tilde{A}_z]\}^{1/4}$ ,  $L_{||}^{hh,lh} = \{(\gamma_1 \pm \gamma)/[(\gamma_1 - 2\gamma)\tilde{A}_x]\}^{1/4} = \{(\gamma_1 \pm \gamma)/[(\gamma_1 - 2\gamma)\tilde{A}_y]\}^{1/4}$ . Численный расчет выполнен для параметров Латтинжера, соответствующих системе на основе GaAs:  $\gamma_1 = 6.98$ ,  $\gamma = 2.58$  [23].

Рис. 1, *a* соответствует предельному случаю тонкого квантового диска, где высота квантовой точки много меньше ее поперечного размера:  $L_z \ll L_x = L_y = L$ . Здесь энергия нормирована на энергию основного состояния поперечного квантования изолированной тяжелой дырки,  $E_{hh}^{\parallel} = 1/L_z^2$ . В этом пределе в нулевом магнитном поле тяжелые и легкие дырки не смешиваются, и состояния характеризуются модулем проекции спина

дырки на ось  $z$ :  $j_z = \pm 3/2$  и  $\pm 1/2$ . Все показанные на рисунке энергетические уровни отвечают основному уровню размерного квантования тяжелой дырки вдоль оси  $z$  и различным уровням размерного квантования в плоскости структуры. Основное состояние дырки при  $B = 0$  двукратно вырождено по проекции полного момента  $\pm 3/2$  на ось структуры. Возбужденные состояния дырки также вырождены, причем помимо крамерсова вырождения, обусловленного инвариантностью системы при  $B = 0$  к инверсии времени, имеет место также дополнительное вырождение, связанное с наличием нетривиального инварианта в двумерном параболическом потенциале [24,25]. Это так называемое случайное вырождение является особенностью используемой модели квантовой точки, кроме параболического потенциала случайное вырождение имеет место еще только для кулоновского потенциала [25,26]. Если магнитное поле слабое, т.е.  $L_B$  велико по сравнению с поперечным размером квантового диска  $L$ , то происходит линейное по магнитному полю расщепление энергетических уровней, вырожденных при  $B = 0$ . В достаточно сильном магнитном поле становятся заметными эффекты, квадратичные по магнитному полю.

Увеличение толщины диска приводит к снятию случайного вырождения, как показано на рис. 1, *b*. В нулевом магнитном поле состояния характеризуются модулем проекции полного момента  $F_z = m_z + j_z$  на ось структуры, где  $m_z$  — проекция орбитального момента огибающей функции дырки на ось роста. Например, основное состояние остается двукратно вырожденным:  $F_z = \pm 3/2$ . Первое возбужденное состояние, четырехкратно вырожденное в тонком диске, в диске конечной толщины расщепится на два двукратно вырожденных состояния с  $F_z = \pm 1/2$  и  $\pm 5/2$ . Приложение магнитного поля полностью снимает вырождение по  $|F_z|$ .

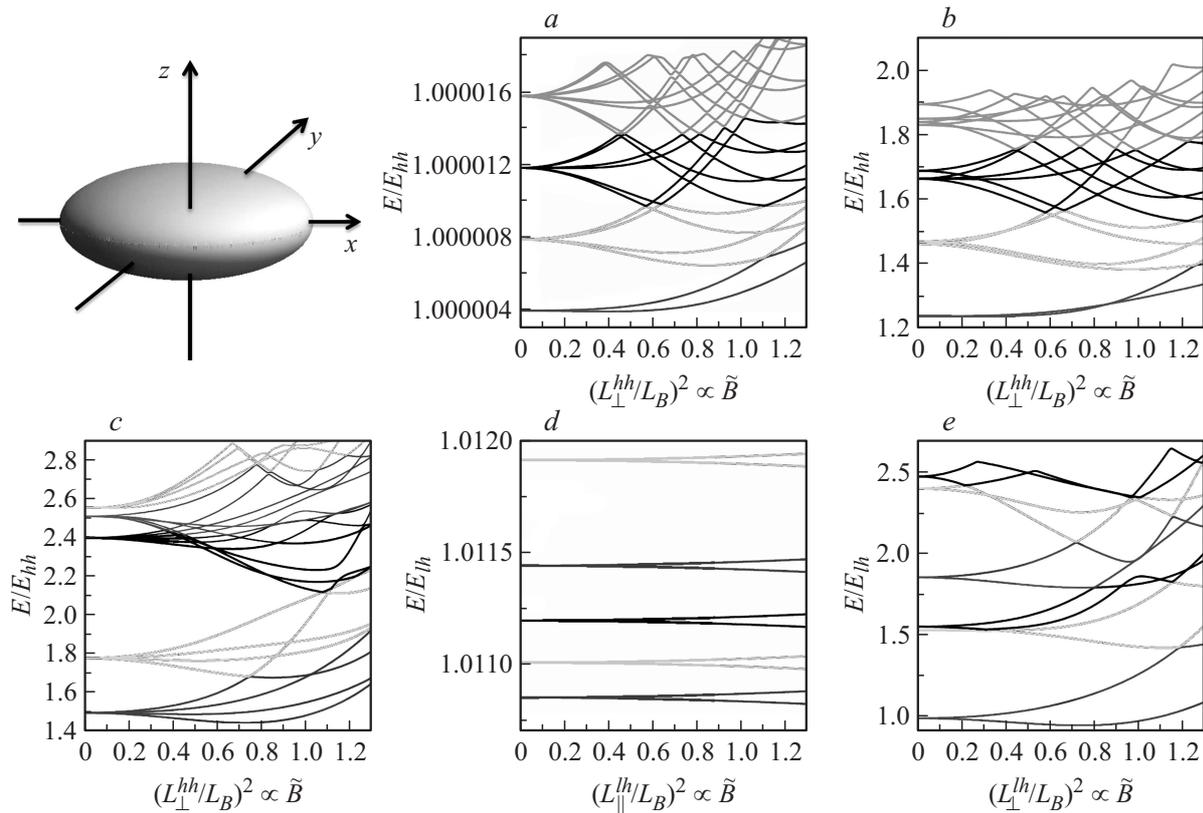
Если выполнено условие  $L = L_z$ , реализуется случай квантовой сферы (рис. 1, *c*). В нулевом магнитном поле уровни энергии дырки квантованы по величине полного момента  $\mathbf{F} = \mathbf{J} + \mathbf{L}$ , где  $\mathbf{J}$  — спин дырки,  $\mathbf{L}$  — ее орбитальный момент, и вырождены по его проекции на направление магнитного поля  $F_z$  [27]. Например, основное состояние дырки в сферической квантовой точке соответствует величине полного момента  $F = 3/2$  и его волновая функция может быть записана как [8,27]

$$\Psi_{S_{3/2}}^{\text{sph}}(\mathbf{r}) = f_1(r)|L = 0, J = 3/2, F = 3/2, F_z\rangle + g_1(r)|L = 2, J = 3/2, F = 3/2, F_z\rangle \quad (8)$$

(здесь использованы стандартные обозначения, введенные в [27]), а волновая функция первого возбужденного состояния может быть представлена в виде

$$\Psi_{P_{3/2}}^{\text{sph}}(\mathbf{r}) = f_2(r)|L = 1, J = 3/2, F = 3/2, F_z\rangle + g_2(r)|L = 3, J = 3/2, F = 3/2, F_z\rangle. \quad (9)$$

Здесь  $f_{1,2}(r)$  и  $g_{1,2}(r)$  — радиальные функции, которые рассчитываем следуя работам [8,27,28], где вместо



**Рис. 1.** Зависимость энергий нескольких нижних уровней энергии размерного квантования дырки в аксиально-симметричной структуре,  $L_x = L_y = L$ , вычисленная для разных соотношений между  $L_z$  и  $L$ , от квадрата отношения характерной длины локализации дырки ( $L_{\perp, \parallel}^i$ ) к магнитной длине для изолированной тяжелой дырки ( $L_B = 1/\sqrt{B}$ ): *a* — тонкий квантовый диск,  $L_z/L \rightarrow 0$ ; *b* — квантовый диск конечной толщины,  $L_z/L = 0.25$ ; *c* — сферически-симметричная квантовая точка,  $L_z = L$ ; *d* — удлиненная квантовая точка,  $L_z \gg L$ ; *e* — квантовая проволока,  $L_z \rightarrow \infty$ . Численный расчет выполнен для параметров Латтинжера, соответствующих GaAs (см. пояснения в тексте).

кулоновского потенциала мелкого акцептора необходимо взять параболический потенциал квантовой точки. На рис. 1, *c*  $E_{hh} = 3/L^2 = 3/L_z^2$  — энергия основного состояния размерного квантования изолированной тяжелой дырки в соответствующей квантовой сфере. В слабом магнитном поле происходит линейное расщепление вырожденных по  $F_z$  при  $B = 0$  уровней. Если же величина расщепления оказывается сравнимой с расстоянием до соседнего уровня, имеют место антипересечения уровней. При увеличении магнитного поля становится более выраженным квадратичный по величине магнитного поля диамагнитный сдвиг.

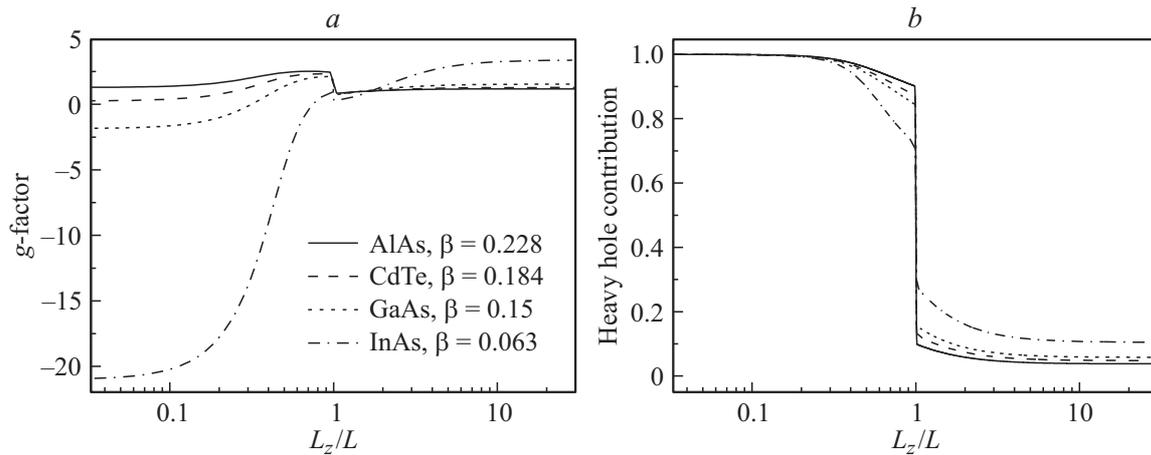
На рис. 1, *d* приведены дырочные уровни в случае, когда  $L_z \gg L$ . Здесь  $E_{hh}^{\perp}$  — энергия основного состояния размерного квантования изолированной легкой дырки в поперечном сечении структуры. Отметим, что основное состояние дырки в такой удлиненной квантовой точке сформировано в основном блоховскими функциями с  $j_z = \pm 1/2$  [28,29]. Здесь состояния дырки характеризуются так же, как в случае квантового диска, проекцией полного момента на ось структуры  $F_z = j_z + m_z$ . В нулевом магнитном поле все состояния двукратно

вырождены. Из рисунка видно, что даже если магнитная длина мала по сравнению с высотой квантовой точки, весь эффект от магнитного поля сводится к линейному расщеплению уровней. Это связано с тем, что магнитное поле, направленное вдоль оси  $z$ , не влияет на зависимость волновой функции дырки от соответствующей координаты. Более того, во всем диапазоне, показанном на рисунке, магнитное поле остается достаточно слабым, чтобы не влиять на квантование дырки в поперечном сечении квантовой точки.

Наконец, рассмотрим предельный случай квантовой проволоки, где  $L_z \rightarrow \infty$  и локализация вдоль оси  $z$  отсутствует (см. рис. 1, *e*). В слабых магнитных полях, где  $L_B \gg L$ , наблюдается линейное расщепление двукратно вырожденных по проекции полного момента  $F_z$  уровней энергии. Если же магнитная длина становится сравнимой с поперечным размером проволоки, доминируют эффекты, квадратичные по магнитному полю.

### 3.2. Спиновое расщепление в магнитном поле

Как уже отмечалось, включение магнитного поля приводит к полному снятию вырождения уровней дырки



**Рис. 2.** Зависимость  $g$ -фактора (а) и доли тяжелой дырки в волновой функции (б) для основного состояния в цилиндрически симметричной квантовой точке,  $L_x = L_y = L$ , от отношения высоты точки к диаметру  $L_z/L$  для нескольких наборов параметров, соответствующих различным полупроводниковым материалам.

в квантовой точке. В слабых магнитных полях расщепление вырожденных при  $B = 0$  уровней  $\Delta E$  линейно по величине поля, что позволяет ввести эффективный  $g$ -фактор согласно

$$g = \frac{\Delta E}{\mu_B B}. \quad (10)$$

Знак  $\Delta E$  и соответственно  $g$ -фактора определяется следующим образом. Если при приложении магнитного поля вдоль оси  $z$  ниже по энергии оказывается состояние с отрицательной проекцией полного момента на эту ось, то  $g$ -фактор считается положительным. Если ниже по энергии оказываются состояния с положительной проекцией спина на направление магнитного поля, то  $g$ -фактор считается соответственно отрицательным. Определение (10) имеет смысл в случае, если в нулевом магнитном поле уровень энергии двукратно вырожден по модулю проекции полного момента на направление магнитного поля. В случае, если в нулевом магнитном поле кратность вырождения состояния больше двух, разумно определять  $g$ -фактор отдельно для каждой пары состояний с заданным модулем проекцией момента на направление магнитного поля. Отметим, что величина  $g$ -фактора зависит только от соотношения между размерами квантовой точки  $L_x, L_y, L_z$ , но не от их абсолютных значений.

Начнем анализ зависимости  $g$ -фактора от параметров системы со случая аксиально-симметричной структуры. На рис. 2, а показана зависимость  $g$ -фактора основного состояния дырки от отношения высоты точки к ее диаметру,  $L_z/L$ . Отметим, что при  $L_z = L$  основное состояние четырехкратно вырождено и скачок  $g$ -фактора анализируется отдельно ниже. Во всех остальных случаях основное состояние двукратно вырождено и  $g$ -фактор определяется согласно формуле (10). Расчет выполнен для нескольких наборов параметров  $\gamma, \gamma_1$ , соответствующих AlAs [23], CdTe [30], GaAs [23], InAs [23].

В предельном случае квантового диска,  $L_z \ll L$ , величина  $g$ -фактора близка к его значению в квантовой яме [31]:

$$g_{2d} = -6\chi + 12 \frac{\hbar^2}{m_0} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{|(lh_{2n}|\gamma\hat{k}_z|hh_1)|^2}{E_{lh_{2n}} - E_{hh_1}} = -6\chi + \gamma_1 G_1(\beta), \quad (11)$$

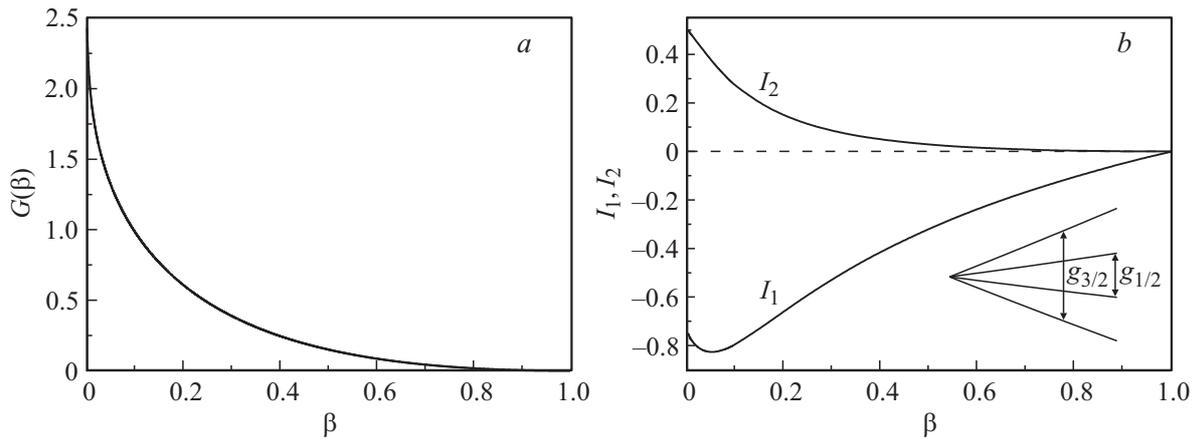
где  $|hh_1\rangle$  — основное состояние тяжелой дырки при нулевом волновом векторе в плоскости квантовой ямы,  $|lh_{2n}\rangle$  — четные возбужденные состояния легкой дырки,  $E_{hh_1}$  и  $E_{lh_{2n}}$  — соответствующие энергии. Формула (11) может быть записана в виде

$$g_{2d} = -6\chi + \gamma_1 G_1(\beta), \quad (12)$$

где

$$\beta = \frac{\gamma_1 - 2\gamma}{\gamma_1 + 2\gamma}$$

— отношение эффективных масс легкой и тяжелой дырок, а  $G(\beta)$  — безразмерная функция, зависящая только от вида потенциала квантовой ямы и которая для параболического потенциала представлена на рис. 3, а. В этом пределе основное состояние дырки описывается главным образом блоховскими функциями с проекцией момента  $\pm 3/2$  (тяжелых дырок). Перенормировка  $g$ -фактора по отношению к его значению  $g^{\text{bulk}} = -6\chi$  для тяжелой дырки в объемном кристалле связана с магнитоиндуцированным смешиванием с состояниями легкой дырки [10,31]. В зависимости от параметров материала значение  $g$ -фактора основного состояния дырки в предельном случае квантового диска может быть как положительным (например, AlAs, CdTe), так и отрицательным (например, GaAs, InAs), и оно больше в материалах с большим значением отношения масс легкой и тяжелой дырок  $\beta$ .



**Рис. 3.** Зависимости безразмерных функций  $G$  и  $I_1, I_2$  от отношения масс легкой и тяжелой дырок  $\beta$  для квантового диска (а) и квантовой сферы с параболическим потенциалом (b). На вставке (b) — схема энергетических уровней.

Увеличение высоты квантовой точки приводит к увеличению  $g$ -фактора за счет сближения по энергии состояний тяжелой и легкой дырок. Если в пределе квантового диска  $g$ -фактор отрицателен, то при некоторой высоте квантовой точки он обращается в нуль за счет компенсации объемного вклада (3) и вклада, связанного с магнитоиндуцированным смешиванием дырок [32].

В квантовой точке со сферически-симметричным потенциалом размерного квантования в нулевом магнитном поле основное состояние дырки четырехкратно вырождено. В магнитном поле основное состояние расщепляется на эквидистантные в малом поле подуровни (см. рис. 1, c). В изотропном случае определение эффективного  $g$ -фактора (10), таким образом, теряет смысл. Разрыв на графике связан с тем, что в слегка сплюснутых точках ( $L_z < L$ ) основное состояние дырки соответствует в основном блоховским функциям с проекций момента  $\pm 3/2$  (тяжелым дыркам), а в слегка вытянутых — с проекцией момента  $\pm 1/2$  (легким дыркам). Поэтому в пределе  $L_z \rightarrow L - 0$   $g$ -фактор соответствует расщеплению двух крайних состояний квадруплета, а в пределе  $L_z \rightarrow L + 0$  — двух средних состояний, что приводит к скачку в 3 раза. Соответствующая схема энергетических уровней показана на вставке к рис. 3, b. Согласно [8], в изотропном потенциале

$$g_{1/2}^{\text{sph}} = \frac{g_{3/2}^{\text{sph}}}{3} = 2\kappa + \frac{8}{5}\gamma I_1 + \frac{4}{5}[\gamma_1 - 2(\gamma + \kappa)]I_2, \quad (13)$$

где

$$I_1 = \int_0^\infty r^3 g_1(r) \frac{df_1(r)}{dr} dr, \quad I_2 = \int_0^\infty r^2 g_1^2(r) dr \quad (14)$$

определяются радиальными функциями  $f_1(r)$  и  $g_1(r)$ , введенными в (8). Зависимости величин  $I_1$  и  $I_2$  от отношения масс легкой и тяжелой дырок показаны на рис. 3, b.

При дальнейшем увеличении высоты квантовой точки достигается предел квантовой проволоки. В этом пределе в нулевом магнитном поле основное состояние дырки двукратно вырождено и ему соответствуют следующие собственные состояния:

$$\Psi_{\pm 1/2}^{\text{wire}} = \psi_1(\rho) |j_z = \pm 1/2\rangle + \psi_2(\rho) \exp(\mp 2i\varphi) |j_z = \mp 3/2\rangle, \quad (15)$$

где  $\rho$  и  $\varphi$  — полярные координаты в поперечном сечении квантовой проволоки,  $\psi_1(\rho)$  и  $\psi_2(\rho)$  — радиальные функции, зависящие от отношения масс  $\beta$  [28]. При приложении магнитного поля вырождение снимается и  $g$ -фактор основного состояния дырки в квантовой проволоке может быть представлен в виде [28]

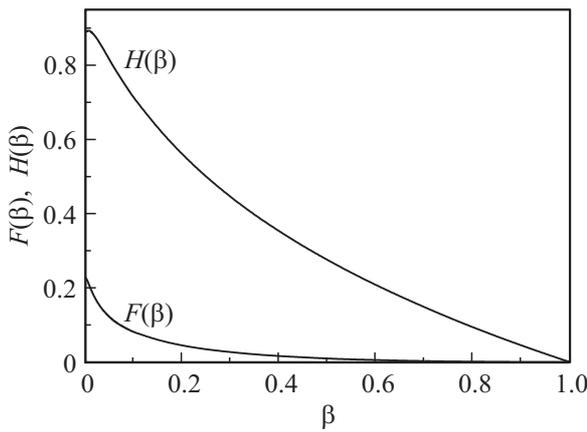
$$g^{\text{wire}} = -2\kappa - 4(\gamma_1 + \gamma - 2\kappa)F(\beta) + 2\sqrt{3}\gamma H(\beta), \quad (16)$$

где

$$F(\beta) = \int_0^\infty \psi_2^2(\rho) \rho d\rho, \\ H(\beta) = \int_0^\infty \left[ \left( \psi_2(\rho) \frac{d\psi_1(\rho)}{d\rho} - \psi_1(\rho) \frac{d\psi_2(\rho)}{d\rho} \right) \rho^2 - 2\rho \psi_1(\rho) \psi_2(\rho) \right] d\rho \quad (17)$$

— безразмерные интегралы функций  $\psi_1(\rho)$  и  $\psi_2(\rho)$ , введенных в (15). Зависимости  $F(\beta)$  и  $H(\beta)$  показаны на рис. 4. Здесь зависимость предельного значения величины  $g$ -фактора дырки от отношения масс легкой и тяжелой дырок  $\beta$  противоположна той, которая имеет место для квантового диска: чем меньше величина  $\beta$ , тем больше предельное значение.

Отметим, что зависимость  $g$ -фактора дырки от геометрии потенциала размерного квантования коррелирует с изменением вклада тяжелой дырки в волновую функцию основного состояния. Полная доля блоховских состояний с проекциями момента  $\pm 3/2$  в дырочной волновой



**Рис. 4.** Зависимости безразмерных величин  $F$  и  $H$  от отношения масс легкой и тяжелой дырок  $\beta$  для квантовой проволоки с параболическим потенциалом.

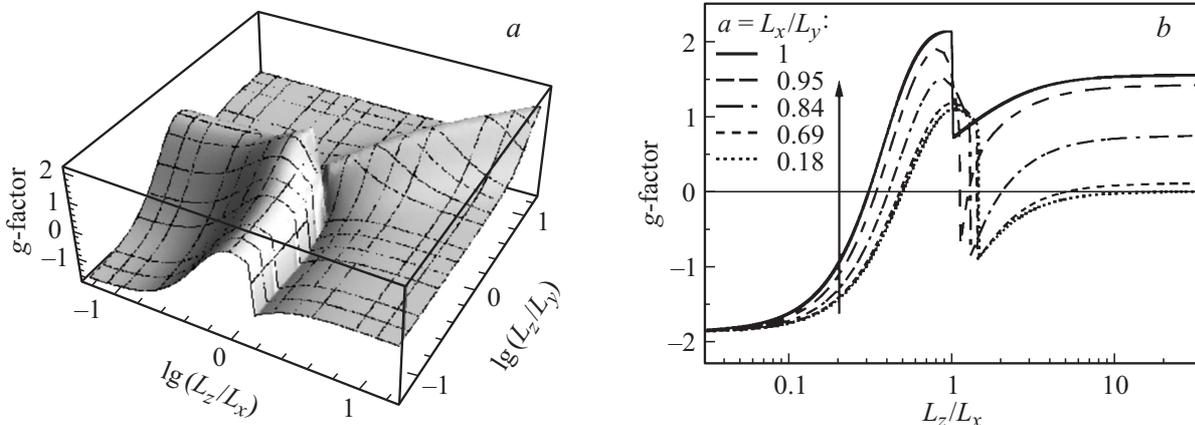
функции представлена на рис. 2, *b*. Из рисунка видно, что в пределе квантового диска волновая функция основного состояния дырки практически полностью состоит из тяжелых дырок в независимости от отношения масс легкой и тяжелой дырок  $\beta$ . При увеличении высоты диска увеличится доля легких дырок, что приводит не только к росту  $g$ -фактора, но даже в некоторых случаях к изменению его знака. При  $L_z = L$ , когда потенциал размерного квантования становится изотропным, происходит переход от состояния, в котором доминирует тяжелая дырка, к состоянию, основной вклад в которое вносит легкая дырка. Это соответствует скачку  $g$ -фактора и скачку на зависимости вклада тяжелой дырки в волновую функцию, как показано на рис. 2, *a* и *b*. В предельном случае квантовой проволоки вклад тяжелой дырки тем больше, чем меньше параметр  $\beta$ , что отразится и на предельном значении  $g$ -фактора.

### 3.3. Эффекты анизотропии системы

Теперь перейдем к наиболее общему случаю полностью анизотропного потенциала квантовой точки, в которой  $L_x \neq L_y \neq L_z$ . На рис. 5, *a* показана зависимость  $g$ -фактора основного состояния дырки от отношений  $L_z/L_x$  и  $L_z/L_y$ , а на рис. 5, *b* показаны зависимости  $g$ -фактора от  $L_z/L_x$ , рассчитанные при фиксированном отношении  $a = L_x/L_y$  (от 1 до 0.18) для параметров GaAs. Качественный ход кривых на рис. 5, *b* одинаков, однако положение точки скачка и величина разрыва  $g$ -фактора зависят от отношения  $L_x/L_y$ , характеризующего анизотропию потенциала в плоскости структуры, перпендикулярной магнитному полю.

Отметим, что при  $L_x \neq L_y$  зависимость  $g$ -фактора от отношения  $L_z/L_x$  может иметь два нуля (например, для параметров GaAs). Природа первого из них (при  $L_z < L_x < L_y$ ) уже обсуждалась выше и обусловлена конкуренцией двух вкладов в эффект Зеемана. Также дырочный  $g$ -фактор обращается в нуль второй раз при  $L_z/L_x = L_y/L_x$ , т.е. когда квантовая точка становится изотропной в плоскости ( $zy$ ), содержащей магнитное поле. Этот нуль имеет симметричную природу и имеет место при любых значениях параметров Латтинжера: при  $L_z = L_y > L_x$  основное состояние дырки в нулевом магнитном поле соответствует проекциям полного момента  $F_x = +3/2$  и  $-3/2$  на ось  $x$ , вдоль которой квантование самое сильное. В этом случае рассматриваемой модели вклады кубической анизотропии в (1) и (3) не учитываются, и магнитное поле может смешивать только состояния с разностью проекций момента  $\pm 1$ .

Подобная ситуация имеет место в широко используемой в экспериментах геометрии, когда магнитное поле приложено в плоскости квантового диска или квантовой ямы, где  $L_z \ll L_x, L_y$  и  $\mathbf{B} \parallel x$ : соответствующая компонента  $g$ -фактора тяжелой дырки, как правило, мала [21]. Проанализируем относительные вклады в  $g$ -фактор тяжелой дырки в плоскости квантовой точки



**Рис. 5.** Зависимость  $g$ -фактора основного состояния дырки в анизотропной квантовой точке,  $L_x \neq L_y$ : *a* — от  $\lg(L_z/L_x)$  и  $\lg(L_z/L_y)$ , *b* — от  $L_z/L_x$  при фиксированных значениях  $L_x/L_y$  (от 1 до 0.18). Расчет выполнен для параметров Латтинжера, соответствующих GaAs.

от кубических членов, связанных с параметром  $q$  [7]:

$$\hat{H}_3 = -2q\mu_B(J_x^3 B_x + J_y^3 B_y + J_z^3 B_z), \quad (18)$$

которые приводят к поперечному  $g$ -фактору  $g_{\perp} = -3q$  [21], и от анизотропии формы точки  $\alpha = (L_z - L_y)/(L_z + L_y)$  при использовании сферического приближения для гамильтониана Латтинжера. Последний представлен на рис. 6 для различных отношений  $L_z/L_x$  (от 0.056 до 0.316) и параметров, соответствующих GaAs. При малых значениях  $\alpha$  зависимости могут быть аппроксимированы линейной функцией

$$g = C\sqrt{\frac{L_z}{L_x}}\alpha, \quad (19)$$

где  $C$  — константа. Из рис. 6 видно, что при параметрах GaAs, когда  $g_{\perp} = -3q \approx 0.06$ , и достаточно малом отношении высоты точки к ее латеральному размеру вклад анизотропии формы квантовой точки в  $g$ -фактор пренебрежимо мал. Описание эффекта Зеемана в квантовых дисках в магнитном поле, приложенном в плоскости структуры, требует, таким образом, учета эффектов кубической анизотропии, а также интерфейсного смешивания тяжелой и легкой дырок [33], рассмотрение которых выходит за рамки данной работы.

Теперь рассмотрим случай магнитного поля, направленного под углом к главным осям структуры. Во всех случаях кроме изотропного (в котором оси можно направить произвольно) основное состояние дырки двукратно вырождено, и для его описания можно ввести оператор псевдоспина  $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ , где  $\sigma_i$  — матрицы Паули,  $i = x, y, z$  — главные оси структуры. Тогда зеемановское расщепление основного состояния слабых полях может быть записано как

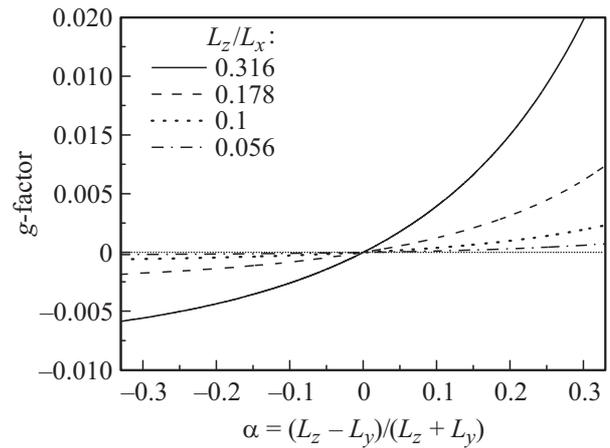
$$\hat{H}_Z = \frac{\mu_B}{2}(g_{xx}\sigma_x B_x + g_{yy}\sigma_y B_y + g_{zz}\sigma_z B_z), \quad (20)$$

где  $g_{ii}$  — компоненты тензора  $g$ -фактора вдоль главных осей,  $B_i$  — соответствующие компоненты магнитного поля. В этом случае расщепление уровня можно записать как

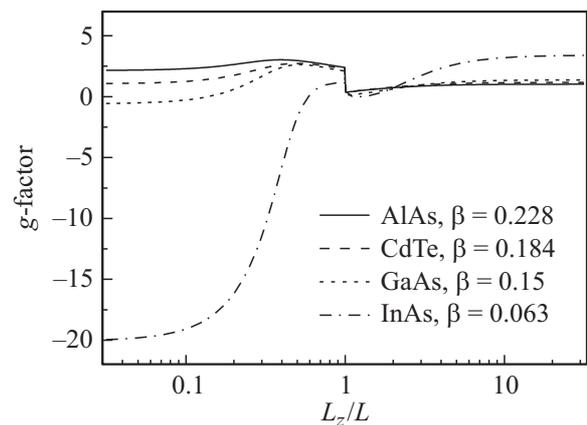
$$\Delta E = \mu_B \sqrt{g_{xx}^2 B_x^2 + g_{yy}^2 B_y^2 + g_{zz}^2 B_z^2}. \quad (21)$$

Компоненты тензора  $g$ -фактора  $g_{xx}$ ,  $g_{yy}$ ,  $g_{zz}$  могут быть вычислены независимо друг от друга в рамках нашей модели путем поворота структуры так, чтобы интересующее нас направление ( $x$  или  $y$ ) совпало с осью  $z$ . Величины  $g_{xx}$ ,  $g_{yy}$ ,  $g_{zz}$  в общем случае независимы, в аксиально-симметричной структуре с осью вдоль  $z$  выполнено  $g_{xx} = g_{yy}$ , в симметричном квантовом диске  $g_{xx} = g_{yy} = 0$ .

В конце этого раздела кратко проанализируем влияние гофрировки валентной зоны на  $g$ -фактор основного состояния дырки. На рис. 7 показаны зависимости  $g$ -фактора основного состояния дырки в цилиндрически-симметричной квантовой точке  $L_x = L_y = L$  от отношения высоты точки к диаметру  $L_z/L$  для нескольких



**Рис. 6.** Зависимость  $g$ -фактора основного состояния дырки в квантовом диске с осью роста вдоль оси  $x$  от анизотропии латерального потенциала диска  $\alpha = (L_z - L_y)/(L_z + L_y)$ . Расчет выполнен для параметров Латтинжера, соответствующих GaAs.



**Рис. 7.** Зависимость  $g$ -фактора основного состояния в цилиндрически-симметричной квантовой точке,  $L_x = L_y = L$ , от отношения высоты точки к диаметру  $L_z/L$  для нескольких наборов параметров, соответствующих различным полупроводниковым материалам, с учетом гофрировки валентной зоны для структуры, выращенной вдоль направления  $z \parallel [001]$ .

наборов параметров Латтинжера, рассчитанные с учетом гофрировки валентной зоны. Сравнение кривых на рис. 7 с соответствующими зависимостями на рис. 2, а, вычисленными в рамках сферического приближения, показывает, что качественный вид зависимостей аналогичен, различия только количественные. Например, для параметров GaAs в пределе квантового диска, в котором погрешность сферического приближения оказывается наибольшей, различие при вычислении поправки к величине объемного  $g$ -фактора составляет не более 20%. Таким образом, в рамках сферического приближения в большинстве случаев можно хорошо оценить величину  $g$ -фактора основного состояния дырки в квантовой точке. Выход за рамки сферического приближения

необходим, если величина  $g$ -фактора, вычисленного с его применением, оказывается близкой к нулю, либо требуется большая точность расчета.

#### 4. Заключение

Итак, в данной работе нами проведено теоретическое исследование эффекта Зеемана в валентной зоне полупроводниковых наноструктур. На примере аксиально-симметричной структуры исследованы строение энергетического спектра дырки в магнитном поле и зависимость  $g$ -фактора ее основного состояния от отношения высоты квантовой точки к ее поперечному размеру. Подробно изучены частные случаи квантового диска (высота много меньше диаметра), сферически-симметричной квантовой точки (высота равна диаметру) и квантовой проволоки (высота много больше диаметра), а также переходы между ними. Для случаев квантового диска и квантовой сферы результаты нашего численного расчета  $g$ -фактора дырки согласуются с известными аналитическими формулами. Для предела квантовой проволоки получено универсальное выражение для величины  $g$ -фактора основного состояния дырки, зависящее только от параметров Латтижера и вида потенциала структуры. Выполнен расчет зависимости  $g$ -фактора основного состояния дырки от формы квантовой точки при произвольном соотношении между размерами точки вдоль осей координат. Исследован случай латерально-анизотропного квантового диска и магнитного поля, приложенного в плоскости структуры. Показано, что вклад в  $g$ -фактор дырки от такой анизотропии в типичных полупроводниках мал по сравнению с вкладом от кубических членов, связанных с параметром  $q$ . Установлена корреляция между изменением структуры волновой функции дырки и величиной ее  $g$ -фактора. Показано, что сферическое приближение для гамильтониана Латтинжера достаточно хорошо применимо при вычислении  $g$ -фактора основного состояния дырки в квантовой точке.

За финансовую поддержку М.А. Семина благодарит РФФИ (грант № 13-02-00888), Р.А. Сурис благодарит РФФИ (грант № 14-02-01223).

Авторы благодарят М.М. Глазова за полезные обсуждения.

#### Список литературы

- [1] *Spin physics in semiconductors*, ed. by M.I. Dyakonov (Springer-Verlag, Berlin–Heidelberg, 2008).
- [2] L. Roth, B. Lax, S. Zwerdling. *Rhys. Rev.*, **114**, 90 (1959).
- [3] Е.Л. Ивченко, А.А. Киселев. *ФТП*, **26**, 1471 (1992).
- [4] А.А. Киселев, Е.Л. Ивченко, U. Rössler. *Phys. Rev. B*, **58**, 16353 (1998).
- [5] В.К. Калевич, В.Л. Корнев. *Письма ЖЭТФ*, **57**, 557 (1993).
- [6] I.A. Yugova, A. Greulich, D.R. Yakovlev, A.A. Kiselev, M. Bayer, V.V. Petrov, Y.K. Dolgikh, D. Reuter, A.D. Wieck. *Phys. Rev. B*, **75**, 245 302 (2007).
- [7] J.M. Luttinger. *Phys. Rev.*, **102**, 1030 (1956).
- [8] Б.Л. Гельмонт, М.И. Дьяконов. *ФТП*, **7**, 2013 (1973).
- [9] Th. Wimbauer, K. Oettinger, A.L. Efros, B.K. Meyer, H. Brugger. *Phys. Rev. B*, **50**, 8889 (1994).
- [10] А.А. Киселев, Л.И. Моисеев. *ФТТ*, **38**, 1574 (1996).
- [11] А.А. Киселев, K.W. Kim, E. Yablonovich. *Phys. Rev. B*, **64**, 125 303 (2001).
- [12] A.L. Efros, A.V. Rodina. *Solid State Commun.*, **72**, 645 (1989).
- [13] A.V. Rodina, A.L. Efros. *Phys. Rev. B*, **82**, 125 324 (2010).
- [14] M. Bayer, A. Kuther, A. Forchel, A. Gorbunov, V.B. Timofeev, F. Schäfer, J.P. Reithmaier, T.L. Reinecke, S.N. Walck. *Phys. Rev. Lett.*, **82**, 1748 (1999).
- [15] M.V. Durnev, M.M. Glazov, E.L. Ivchenko. *Physica E*, **44**, 797 (2012).
- [16] M.V. Durnev, M.M. Glazov, E.L. Ivchenko, M. Jo, T. Mano, T. Kuroda, K. Sakoda, S. Kunz, G. Sallen, L. Bouet, X. Marie, D. Lagarde, T. Amand, B. Urbaszek. *Phys. Rev. B*, **87**, 085 315 (2013).
- [17] М.В. Дурнев. *ФТТ*, **56** (7), 1364 (2014).
- [18] W. Que. *Phys. Rev. B*, **45**, 11 036 (1992).
- [19] P. Hawrylak. *Phys. Rev. B*, **60**, 5597 (1999).
- [20] V. Halonen, T. Chakraborty, P. Pietiläinen. *Phys. Rev. B*, **45**, 5980 (1992).
- [21] X. Marie, T. Amand, P. Le Jeune, M. Paillard, P. Renucci, L.E. Golub, V.D. Dymnikov, E.L. Ivchenko. *Phys. Rev. B*, **60**, 5811 (1999).
- [22] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика (нерелятивистская теория)*. Издание 3-е (М., Наука, 1974).
- [23] I. Vurgaftman, J.R. Meyer, L.R. Ram-Mohan. *J. Appl. Phys.*, **89**, 5815 (2001).
- [24] R.D. Mota, V.D. Granados, A. Queijeiro, J. Garcia. *J. Phys. A: Math. Gen.*, **35**, 2979 (2002).
- [25] М.А. Семина, Р.А. Сурис. *Письма ЖЭТФ*, **94** (7), 614 (2011).
- [26] D.G.W. Parfitt, M.E. Portnoi. *J. Math. Phys.*, **43**, 4681 (2002).
- [27] A. Baldereschi, N.O. Lipari. *Phys. Rev. B*, **8**, 2697 (1973).
- [28] М.А. Семина, Р.А. Сурис. *ФТП*, **45**, 947 (2011).
- [29] D. Csontos, P. Brusheim, U. Zülicke, H.Q. Xu. *Phys. Rev. B*, **79**, 155 323 (2009).
- [30] G. Milchber, K. Saminadayar, E. Molva, H.R. Zelsmann. *Phys. Status Solidi B*, **125**, 795 (1984).
- [31] T. Wimbauer, K. Oettinger, A.L. Efros, B.K. Meyer, H. Brugger. *Phys. Rev. B*, **50**, 8889 (1994).
- [32] A. Arora, A. Mandal, S. Chakrabarti, S. Ghosh. *J. Appl. Phys.*, **113**, 213 505 (2013).
- [33] И.Л. Алейнер, Е.Л. Ивченко. *Письма ЖЭТФ*, **55**, 662 (1992).

Редактор Л.В. Шаронова

## Holes localized in nanonstructures in external magnetic field: $g$ -factor and mixing of states

*M.A. Semina, R.A. Suris*

Ioffe Institute,  
194021 St. Petersburg, Russia

**Abstract** Holes energy spectra and wave functions in valence band of semiconductor nanostructures — quantum wells, wires and dots — in the presence of the external magnetic field have been studied theoretically. The dependence of the Zeeman splitting of the hole ground state on the parameters of the size-quantization with taking into account the complex structure of the valence band and magnetic field induced mixing of the hole states have been investigated. The analytical formula describing Zeeman effect in the valence band in limiting cases of quantum disk, wire and dot had been presented. It was shown, that the value of the hole  $g$ -factor is extremely sensitive to the structure of the hole state (mostly heavy hole or light hole), and, consequently, to the size quantization potential geometry.