Письма в ЖЭТФ, том 98, вып. 2, с. 110 – 115

Спиновое расщепление 2D-состояний в зоне проводимости несимметричных гетероструктур: вклад атомарно резкого интерфейса

Ж. А. Девизорова[1], *В. А. Волков*

Московский физико-технический институт, 141700 Долгопрудный, Россия

Институт радиотехники и электроники им. Котельникова РАН, 125009 Москва, Россия

Поступила в редакцию 13 мая 2013 г.

После переработки 10 июня 2013 г.

Исследовано влияние атомарно резкого непроницаемого интерфейса на спиновое расщепление спектра 2D-электронов в гетероструктурах на основе (001) A_3B_5. Для этого однозонный гамильтониан Γ_6 для огибающих функций (ОФ) дополнен граничным условием (ГУ) общего вида, учитывающим возможность существования таммовских состояний. Оно учитывает также спин-орбитальное взаимодействие, асимметрию квантовой ямы и нецентросимметричность кристалла и содержит единственную феноменологическую длину R, характеризующую строение интерфейса на атомных масштабах. Рассмотрена модель квазитреугольной ямы, созданной полем F. После унитарного преобразования к нулевым ГУ в модифицированном гамильтониане появляется интерфейсный вклад, из которого с помощью усреднения по быстрому движению вдоль нормали получается спиновый 2D-гамильтониан. В отсутствие магнитного поля **B** он является суммой термов Дрессельхауза и Бычкова–Рашбы, но с перенормированными за счет интерфейсного вклада константами. В поле **B**, содержащем квантующую компоненту B_z, недиагональные (в кубических осях) компоненты тензора g-фактора линейно зависят от $|B_z|$ и номера уровня Ландау N. Полученные результаты качественно согласуются с экспериментом.

DOI: 10.7868/S0370274X13140105

1. Введение. Спин-орбитальное взаимодействие приводит к спиновому расщеплению энергий двумерных (2D) электронов в несимметричных структурах на основе A_3B_5. Взаимодействие с электрическими полями описывается разными спин-зависимыми вкладами в эффективный 2D-гамильтониан:

$$\Delta\hat{H}_{2D} = \alpha_{\mathrm{BIA}}(\sigma_y p_y - \sigma_x p_x) + \alpha_{\mathrm{SIA}}(\sigma_x p_y - \sigma_y p_x). \quad (1)$$

Здесь x, y, z – кубические оси, причем z – ось размерного квантования, σ_x, σ_y, σ_z – матрицы Паули. Первое слагаемое в (1) обусловлено отсутствием центра инверсии в объемном кристаллическом потенциале (терм Дрессельхауза [1–5]). Второе (терм Бычкова–Рашбы [6, 7], известное также как взаимодействие Рашбы) связано с асимметричностью потенциала структуры $V(z)$.

При выводе явных выражений для констант Дрессельхауза (α_{BIA}) и Рашбы (α_{SIA}) чаще всего применяется метод эффективных волновых функций, которые являются огибающими полной волновой функции. В рамках этого приближения константы обычно определяются выражениями [1–5]

$$\alpha^{(0)}_{\mathrm{BIA}} = \frac{\gamma_c(\hat{p}_z^2)_{00}}{\hbar^3}, \qquad \alpha^{(0)}_{\mathrm{SIA}} = a_{\mathrm{SO}}(\partial_z V)_{00}, \quad (2)$$

где γ_c – константа кубичного по импульсу спинового расщепления зоны проводимости объемного полупроводника типа A_3B_5 (объемная константа Дрессельхауза), a_{SO} – константа, определяемая параметрами зонной структуры и величиной спин-орбитального взаимодействия. Усреднение ведется по огибающим функциям (ОФ) основной 2D-подзоны. Интерфейсные вклады в константы Дрессельхауза и Рашбы пока не выписываются. Их вывод – одна из целей настоящей работы. Заметим, что в рамках метода плавных ОФ для рассматриваемой ниже модели высокого гетеробарьера они исчезают.

В (2) существенно использовано, что метод ОФ применим во всем пространстве, включая область гетерограниц [8, 9]. Однако этот метод применим для описания только плавных (на атомарных масштабах) полей и не годится для реального случая атомарно резких границ раздела. Информацию о микроскопи-

[1] e-mail: DevizorovaZhanna@gmail.com; VoVA@cplire.ru

ческом строении гетерограницы можно учесть с помощью соответствующих граничных условий (ГУ) для ОФ.

Проблема таких ГУ имеет долгую историю. Теоретические работы по ним можно разбить на две группы. Работы первой группы, наиболее многочисленные, посвящены выводу "двусторонних" ГУ, связывающих ОФ и их производные слева и справа от интерфейса. Они содержат разные подходы к решению математических проблем, связанных, в частности, с возможным сингулярным поведением ОФ на гетерогранице [5, 9–14].

Работы второй группы посвящены выводу "односторонних" ГУ на интерфейсе кристалл–высокий барьер (в частности, на границе кристалл–вакуум). Задачи этого типа возникают, например, при описании поверхностных (интерфейсных) состояний таммовского типа. Настоящая работа относится ко второй группе, сравнительно малочисленной.

Кратко опишем некоторые результаты из статей второй группы. В бесспиновом случае микроскопический вывод ГУ для ОФ на скачкообразной границе полупроводник ($z \geq 0$) – вакуум ($z < 0$) был, видимо, впервые представлен еще в работах [15, 16]. Выведенные там ГУ содержат граничные параметры, аналитически (но сложным образом) выражающиеся через полную зонную структуру полупроводника, аналитически продолженную в область комплексных квазиимпульсов. Численное определение этих параметров остается нерешенной проблемой. В однозонном пределе ГУ представляет собой линейную связь между функцией и производной с единственным граничным параметром размерности длины, который ниже обозначен буквой R. Эта длина имеет смысл глубины локализации мелкого таммовского состояния, когда оно существует (для этого необходимо выполнение условия $R > 0$). В работе [17] представлен намного более простой вывод этого же ГУ из условия эрмитовости эффективного гамильтониана для ОФ на полупространстве, ограниченном непроницаемым барьером. В рамках такого феноменологического подхода параметр R должен определяться из эксперимента. Модель высокого барьера применима, когда интерфейсная длина R велика по сравнению с длиной проникновения под барьер. Влияние спин-орбитального взаимодействия на ГУ для ОФ и спиновое расщепление 2D-состояний в зоне проводимости центроинверсного полупроводника были рассмотрены в работе [18] в рамках обобщения подхода [17]. Непараболическое обобщение ГУ [18] и терма Бычкова–Рашбы в асимметричной квантовой яме с бесконечными барьерами представлено в работе [19].

В настоящей работе рассмотрено влияние атомарно резкой гетерограницы на эффективный 2D-гамильтониан и спиновое расщепление спектра 2D-электронов в нецентроинверсных кристаллах. Разрыв зон на гетерогранице считается большим, а гетеробарьер – непроницаемым. Последний характеризуется определенным ГУ для ОФ. В отсутствие магнитного поля это приводит к перенормировке выражений для констант α_{BIA} и α_{SIA}. Исследовано также спиновое (зеемановское) расщепление энергии электронов в магнитном поле $\mathbf{B}$ общей ориентации, имеющем квантующую компоненту B_z.

Обычно величина зеемановского расщепления линейно зависит от магнитного поля, причем коэффициент пропорциональности равен магнетону Бора μ_{B}, умноженному на g-фактор. При этом g-фактор электрона в кристалле (g^*) из-за спин-орбитального взаимодействия отличается от своего значения в вакууме ($g_0 = 2$) и существенно зависит от зонной структуры [20]. Однако в кубических кристаллах он по-прежнему является изотропным. В гетероструктурах с симметричной квантовой ямой, выращенной в направлении $z||[001]$, компоненты тензора g вдоль и поперек ямы становятся различными [21]. Эффект объясняется непараболичностью зоны проводимости [22]. Ниже эффектом непараболичности пренебрегается. В гетероструктурах с асимметричной квантовой ямой появляются также отличные от нуля недиагональные (в кубических осях) компоненты тензора g [23].

В недавних прецизионных измерениях спинового резонанса в GaAs квантовых ямах в режиме квантового эффекта Холла [24, 25] была обнаружена зависимость g-фактора от квантующей компоненты магнитного поля B_z и от номера N соответствующего уровня Ландау. Такое необычное поведение $g(B_z)$ мотивировало постановку задачи в настоящей работе.

В п. 2 выведены феноменологические ГУ для ОФ зоны проводимости. При этом использованы требование эрмитовости эффективного многозонного гамильтониана на полупространстве и инвариантность задачи по отношению к обращению времени.

В п. 3 вместо решения задачи с простым однозонным гамильтонианом и сложным граничным условием осуществлено унитарное преобразование к новой, более простой задаче с перенормированным гамильтонианом и стандартным (нулевым) граничным условием. Последующее усреднение по быстрому движению вдоль оси размерного квантования приводит (при $\mathbf{B} = 0$) к эффективному 2D-гамильтониану (1) с константами α_{BIA} и α_{SIA}, содержащими интерфейсные вклады.

Пункт 4 посвящен вычислению g-фактора 2D-электронов. Осуществлен аналогичный переход к перенормированному 2D-гамильтониану зоны проводимости. После усреднения по N-му уровню Ландау найдены компоненты тензора g.

В п. 5 проведено сравнение с экспериментом [25]. Пункт 6 посвящен обсуждению результатов.

2. Граничное условие для ОФ электрона проводимости. Рассмотрим односторонне легированный гетеропереход типа (001) $GaAs/Al_xGa_{1-x}As$. Электроны занимают область $z \geq 0$ и движутся в яме, которая создается плавным на атомарных масштабах потенциалом $V(z)$ при $z > 0$ и резким непроницаемым барьером при $z = 0$. Введем ГУ для ОФ при $z = 0$.

В рамках многозонного метода ОФ динамика электрона проводимости при $z > 0$ описывается уравнением Кона–Латтинжера

$$\left\{ [E_n(0) + V(z)]\, \delta_{nn'} + \frac{\hat{\mathbf{p}}\mathbf{p}_{nn'}}{m_0} + \right.$$
$$\left. + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2}(\mathbf{p}[\boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{\nabla} V_0])_{nn'} \right\} \Phi_{n'} = E\Phi_n, \qquad (3)$$

где n – номер зоны, $E_n(0)$ – энергия экстремума n-й зоны, Φ_n – набор ОФ, $\hat{\mathbf{p}}$ – оператор импульса, $\mathbf{p}_{nn'}$ – матричный элемент оператора импульса на блоховских функциях центра зоны Бриллюэна, m_0 – масса свободного электрона, $\frac{\hbar}{4m_0^2c^2}(\mathbf{p}[\boldsymbol{\sigma} \times \boldsymbol{\nabla} V_0])_{nn'}$ – матричный элемент оператора спин-орбитального взаимодействия на блоховских функциях.

Требование эрмитовости гамильтониана (3) на полупространстве после интегрирования по частям сводится к занулению поверхностного вклада. Это эквивалентно занулению на границе нормальной компоненты оператора тока:

$$(\Phi_\lambda^\dagger \hat{\mathbf{v}}_z \Phi_\nu)|_{z=0} = 0, \qquad (4)$$

где $\hat{\mathbf{v}}_z$ – недиагональная матрица скорости:

$$(\mathbf{v}_z)_{nn'} = \partial_{p_z}(H_{nn'}).$$

Для описания зонной структуры соединений типа A_3B_5 с не очень широкой запрещенной зоной E_g обычно используют модель Кейна [26]. В этой модели учитываются 4 зоны (с учетом спина 8 зон): зона проводимости, зоны тяжелых и легких дырок и спин-орбитально отщепленная зона. Однако эта модель не учитывает отсутствия центра инверсии в кристаллическом потенциале. Поэтому воспользуемся 14-зонной расширенной моделью Кейна [3, 5, 27–29]. Теперь, кроме зон симметрии Γ_{6c}, Γ_{8v} и Γ_{7v}, включенных в стандартную модель Кейна, также учитываются более высокие зоны Γ_{8c} и Γ_{7c}. Гамильтониан (3) становится матрицей 14×14. При этом не зануляются три матричных элемента оператора импульса: P_0 (между функциями зон Γ_{6c} и Γ_{7v}, Γ_{8v}), P_1 (между функциями зон Γ_{6c} и Γ_{7c}, Γ_{8c}) и Q (между функциями зон Γ_{7v}, Γ_{8v} и Γ_{7c}, Γ_{8c}). Отличие P_1 от нуля обусловлено отсутствием центра инверсии в кристалле A_3B_5. Также не зануляется матричный элемент Δ^-, связанный со спин-орбитальным взаимодействием между зонами Γ_{7v}, Γ_{8v} и Γ_{7c}, Γ_{8c}. Задача принимает вид

$$\hat{H}_{14\times 14}\Phi = E\Phi$$

с общим ограничением (4). Так как в многокомпонентной функции Φ велик лишь спинор, отвечающий зоне проводимости Γ_{6c}, сделаем унитарное преобразование $\Phi = e^S\phi$ [3] (с учетом kp-членов до третьего порядка включительно), сводящее гамильтониан к однозонному с эффективной массой m^*.

Теперь 3D-гамильтониан зоны проводимости содержит вклады $\hat{H}_{\mathrm{BIA}}$ и $\hat{H}_{\mathrm{SIA}}$, описывающие спиновое расщепление за счет нецентроинверсности кристалла и асимметрии ямы:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m^*} + V(z) + \hat{H}_{\mathrm{BIA}} + \hat{H}_{\mathrm{SIA}}, \qquad (5)$$

$$\hat{H}_{\mathrm{BIA}} = \frac{\gamma_c}{\hbar^3}\left[\sigma_x p_x(p_y^2 - \hat{p}_z^2) + \sigma_y p_y(\hat{p}_z^2 - p_x^2) + \right.$$
$$\left. + \sigma_z \hat{p}_z(p_x^2 - p_y^2)\right], \qquad (6)$$

$$\hat{H}_{\mathrm{SIA}} = a_{\mathrm{SO}}(\sigma_x p_y - \sigma_y p_x)\partial_z V(z). \qquad (7)$$

Условие (4) тем же преобразованием сводится к ограничению для спинора $\phi = (\phi_1, \phi_2)^t$:

$$\left[\phi_\lambda^\dagger \tilde{v}_z \phi_\nu + (\tilde{v}_z\phi_\lambda)^\dagger \phi_\nu\right]\Big|_{z=0} = 0, \qquad (8)$$

$$\tilde{v}_z = \frac{\hat{p}_z}{m^*} + \frac{i\chi}{m^*}(\sigma_x p_y - \sigma_y p_x) + \frac{2\gamma_c}{\hbar^3}(\sigma_y p_y - \sigma_x p_x)\hat{p}_z +$$
$$+ \frac{\gamma_c}{\hbar^3}\sigma_z(p_x^2 - p_y^2) + \frac{ib}{m^*}\hbar\partial_z V(z),$$

где $b \propto 1/E_g$, $\chi = (g_0 - g^*)m^*/2m_0$ – объемные параметры (для GaAs $\chi \simeq 0.082$). Аналитические вычисления произведены с помощью программы Wolfram Mathematica.

Ограничения (8) недостаточно для определения ГУ. Следуя [30], потребуем инвариантности условия (8) по отношению к операции обращения времени $\hat{T} = i\sigma_y\hat{K}$, где $\hat{K}$ – оператор комплексного сопряжения. Получим T-инвариантные ГУ:

$$\left[1 + i\frac{R\hat{p}_z}{\hbar} + \frac{\chi R}{\hbar}(\sigma_y p_x - \sigma_x p_y) + \right.$$
$$+ i\frac{2m^*\gamma_c R}{\hbar^4}(\sigma_y p_y - \sigma_x p_x)\hat{p}_z +$$
$$\left. + i\frac{m^*\gamma_c R}{\hbar^4}\sigma_z(p_x^2 - p_y^2)\right]\phi\bigg|_{z=0} = 0. \quad (9)$$

Второе [17] и третье [18] слагаемые в ГУ (9) были известны ранее. Последние два являются новыми. Их появление связано со спин-орбитальным взаимодействием на интерфейсе и отсутствием центра инверсии в объемном кристалле. Эти слагаемые можно получить непосредственно из эрмитовости однозонного гамильтониана (5)–(7). Поэтому ГУ (9) не ограничено расширенной моделью Кейна. Вещественная величина R зависит от микроскопического строения границы. Ее физический смысл раскрыт выше.

В рамках метода плавных ОФ для рассматриваемого случая высокого гетеробарьера стандартными являются нулевые ГУ. Далее будем считать отличие ГУ (9) от нулевых малым. Для этого длина R должна быть малой по сравнению с характерными длинами задачи, включая толщину 2D-слоя по оси z. Это позволяет использовать теорию возмущений по малости R. Преобразуем ГУ (9) к более удобному виду, $\hat{\Gamma}\phi|_{z=0} = 0$ с оператором $\hat{\Gamma}$, который с учетом членов до $R^2 p_i p_z$ $(i = x,\, y)$ включительно будет иметь унитарный вид:

$$\hat{\Gamma} = 1 + i\left[\frac{R\hat{p}_z}{\hbar} + \frac{2m^*\gamma_c R}{\hbar^4}(\sigma_y p_y - \sigma_x p_x)\hat{p}_z + \right.$$
$$\left. + \frac{m^*\gamma_c R}{\hbar^4}\sigma_z(p_x^2 - p_y^2) + \frac{\chi R^2}{\hbar^2}(\sigma_x p_y - \sigma_y p_x)\hat{p}_z\right]. \quad (10)$$

3. Вклад интерфейса в эффективный 2D-гамильтониан при $B = 0$. При помощи унитарного (с указанной выше точностью) преобразования $\psi = \hat{\Gamma}\phi$ сведем задачу к новой:

$$(\hat{H} + \delta\hat{H})\psi = E\psi, \qquad \psi|_{z=0} = 0.$$

Поправка к 3D-гамильтониану имеет вид

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

Усреднение $\delta\hat{H}$ по быстрому движению электрона вдоль оси z приводит, помимо несущественного здесь сдвига энергии $R(\partial_z V)_{00}$, к эффективному спиновому 2D-гамильтониану (1). Модифицированные константы $\alpha_{\rm BIA}$ и $\alpha_{\rm SIA}$ содержат вклады, зависящие от интерфейсного параметра R:

$$\alpha_{BIA} = \frac{2m^*\gamma_c}{\hbar^3}\left[\frac{(\hat{p}_z^2)_{00}}{2m^*} + eFR\right], \quad (11)$$

$$\alpha_{\rm SIA} = eF\left(a_{\rm SO} + \frac{\chi R^2}{\hbar}\right), \quad (12)$$

где $F = (\partial_z V/e)_{00}$ – среднее электрическое поле в гетероструктуре, $-e$ – заряд электрона. Результат (11), (12) – один из основных результатов работы.

4. Вклад интерфейса в зеемановское расщепление уровней Ландау. Изучим влияние магнитного поля на спиновое расщепление электронного спектра. Заменим оператор импульса оператором обобщенного импульса [31]: $\hat{p}_i \to \hat{\pi}_i = \hat{p}_i + \frac{e}{c}A_i$, где $\mathbf{A}$ – вектор-потенциал магнитного поля. Некоммутирующие компоненты операторов импульса должны быть заменены на симметризованные комбинации: $\hat{\pi}_i\hat{\pi}_j \to (\hat{\pi}_i\hat{\pi}_j + \hat{\pi}_j\hat{\pi}_i)/2 \equiv \{\pi_i, \pi_j\}$.

Записав с учетом этого гамильтониан (5)–(7) и ГУ (9), (10), осуществим, как и в п. 3, унитарное преобразование волновых функций и перейдем к новой задаче с преобразованным гамильтонианом и нулевым ГУ. Поправка к 3D-гамильтониану будет содержать два вклада, орбитальный и спиновый:

$$\delta\hat{H} = \delta\hat{H}_0 + \delta\hat{H}_s, \quad (13)$$

$$\delta\hat{H}_0 = \frac{eR}{m^*c}\hat{\pi}_x B_y - \frac{eR}{m^*c}\hat{\pi}_y B_x + R\partial_z V, \quad (14)$$

$$\delta\hat{H}_s = \frac{2m^*\gamma_c R}{\hbar^3}\big(\sigma_y\hat{\pi}_y - \sigma_x\hat{\pi}_x\big)\partial_z V +$$
$$+ \frac{R^2\chi}{\hbar}\big(\sigma_x\hat{\pi}_y - \sigma_y\hat{\pi}_x\big)\partial_z V +$$
$$+ \frac{\mu_{\rm B} g^* m^*\gamma_c R}{\hbar^4}\big(-\sigma_z B_x\{\pi_y\pi_z\} +$$
$$+ \sigma_x B_z\{\pi_y\pi_z\} - \sigma_z B_y\{\pi_x\pi_z\} + \sigma_y B_z\{\pi_x\pi_z\}\big) +$$
$$+ \frac{\mu_{\rm B} g^* m^*\gamma_c R}{\hbar^4}(\hat{\pi}_x^2 - \hat{\pi}_y^2)(\sigma_y B_x - \sigma_x B_y) -$$
$$- \frac{\mu_{\rm B} g^* R^2\chi}{\hbar^2}\big(\sigma_z B_y\{\pi_y\pi_z\} - \sigma_y B_z\{\pi_y\pi_z\} +$$
$$+ \sigma_z B_x\{\pi_x\pi_z\} - \sigma_x B_z\{\pi_x\pi_z\}\big). \quad (15)$$

После усреднения по ОФ основной подзоны получим довольно громоздкое выражение для эффективного 2D-гамильтониана. Наконец, проведем усреднение по собственным функциям орбитальной части гамильтониана с учетом вклада (14):

$$\hat{H}_N = \frac{\hbar e|B_z|}{m^*c}\left(N + \frac{1}{2}\right) - \frac{e^2R^2}{2m^*c^2}(B_x^2 + B_y^2) +$$
$$+ eFR + \frac{|\mu_B|}{2}g_{ij}(|B_z|)\sigma_i B_j. \quad (16)$$

Спиновый гамильтониан (16) описывает зеемановское расщепление N-го уровня Ландау $(N = 0, 1, 2, ...)$, сдвинутого по энергии за счет магнитного (B_x, B_y) и электрического (F) полей.

Тензор $g_{ij}(B) = g_{ij}(0) + d_{ij}|B_z|$ анизотропен в плоскости $i, j = x, y$ и неаналитически зависит от B_z из-за специфики квантования Ландау.

Интерфейсные вклады в диагональные компоненты g-фактора определяются произведением длины R и перенормированной константы α_{SIA}:

$$\delta g_{xx}^{\mathrm{int}} = \delta g_{yy}^{\mathrm{int}} = \frac{4m_0R}{\hbar}\alpha_{\mathrm{SIA}}. \tag{17}$$

Недиагональные компоненты имеют интерфейсные вклады, пропорциональные $R\alpha_{\mathrm{BIA}}$:

$$g_{xy}(0) = g_{yx}(0) = \frac{4\gamma_c m_0}{\hbar^4}\left[(p_z^2)_{00}z_{00} - (p_z^2 z)_{00}\right] + \\ + \frac{4m_0R}{\hbar}\alpha_{\mathrm{BIA}}, \tag{18}$$

$$d_{xy} = d_{yx} = -\frac{4\gamma_c e m_0}{\hbar^3 c}R\left(N + \frac{1}{2}\right). \tag{19}$$

Первое слагаемое в (18) было получено в [23]. Второе слагаемое представляет собой искомый интерфейсный вклад. Кроме того, недиагональные компоненты g-фактора линейно зависят от квантующей компоненты магнитного поля $|B_z|$. Коэффициент пропорциональности (19) линеен по номеру соответствующего уровня Ландау и определяется только интерфейсным вкладом.

5. Сравнение с экспериментом. Сравним наши результаты с экспериментальными данными [25], полученными на асимметрично легированной квантовой яме GaAs шириной 20 нм, окруженной барьерами $\mathrm{Al_{0.3}Ga_{0.7}As}$, при концентрации электронов $n_s = 4.4 \cdot 10^{11}$ см$^{-2}$ ($F = 0.304 \cdot 10^5$ В/см).

Недиагональные компоненты тензора g оказываются равными, как и в [23]. Поэтому в осях, совпадающих с направлениями [110], [1$\bar{1}$0], [001], тензор g будет диагональным. Это согласуется с [24, 25].

В наших обозначениях данные [25] в главных осях принимают вид: $g_{x'x'}(0) = -0.292$, $g_{y'y'}(0) = -0.347$, $d_{x'x'} = 0.002$ Тл$^{-1}$, $d_{y'y'} = 0.012$ Тл$^{-1}$. Отсюда найдем компоненты тензора g-фактора в кубических осях: $g_{xx}(0) = -0.3195$, $g_{xy}(0) = 0.0275$, $d_{xy} = -0.005$ Тл$^{-1}$. Отличие диагональных компонент от объемного значения $g^* = -0.44$ связано с интерфейсным вкладом (17) и неучтенным вкладом эффекта непараболичности δg^{np}. В этом приближении из (17) получим $R = 20$ Å. Теперь из сравнения (18) с экспериментом найдем $\gamma_c = 3.4$ эВ·Å^3. Интерфейсный вклад в $g_{xy}(0)$ (см. второе слагаемое в (18)), оказывается равным 0.012, что сравнимо с вкладом первого слагаемого (0.015).

Рассмотрим теперь более тонкий эффект: зависимость $g_{xy}(|B_z|)$. Теория (19) правильно описывает лишь знак d_{xy}. Значение же $d_{xy} = -0.0008\,\mathrm{T}^{-1}$ не согласуется с экспериментом. Значение γ_c также в несколько раз меньше литературных данных [32]. Возможная причина подобного несовпадения заключается в пренебрежении непараболическим вкладом. Учет $\delta g^{np} \neq 0$ уменьшил бы R и увеличил γ_c.

Малость R по сравнению с длинами, характеризующими размерное квантование, оправдывает применение теории возмущений: $z_{00} = 89$ Å; среднее значение параметра $|R\partial_z|$ равно 0.016.

6. Обсуждение. Граничное условие (9) описывает атомарно резкую гетерограницу типа GaAs/AlGaAs с большим разрывом зоны проводимости, отсутствие центра инверсии в объемном кристалле, спин-орбитальное взаимодействие в объеме и на интерфейсе.

Спиновое расщепление электронных уровней Ландау анизотропно, нелинейно и неаналитично по квантующей компоненте магнитного поля. Интерфейсные вклады в диагональные/недиагональные компоненты тензора g-фактора пропорциональны произведению R и перенормированной константы Рашбы/Дрессельхауза. Из сравнения с экспериментом [25] извлечены значения R и γ_c. Знак R обусловлен сделанным в работе частным выбором ориентации осей координат. В общем случае длина R входит в наблюдаемые величины в комбинации Rn_z, где $\mathbf{n}$ – вектор нормали к гетероинтерфейсу (см. [30]). Поэтому при переходе от левого интерфейса, как в данной работе, к эквивалентному правому наблюдаемые величины изменяться не будут.

Отметим, что не только константа Рашбы α_{SIA}, но и константа Дрессельхауза α_{BIA} (хотя и в меньшей степени) теперь зависит от электрического поля F, "прижимающего" электроны к интерфейсу. Это позволяет управлять указанными константами. Для параметров $F = 0.304 \cdot 10^5$ В/см, $\gamma_c = 3.4$ эВ·Å^3, $R = 20$ Å получим следующие значения перенормированных констант: $\alpha_{\mathrm{BIA}}\hbar = 1.2$ мэВ·Å вместо $\alpha_{\mathrm{BIA}}^0\hbar = 0.8$ мэВ·Å и $\alpha_{\mathrm{SIA}}\hbar = 11$ мэВ·Å вместо $\alpha_{\mathrm{SIA}}^0\hbar = 1.4$ мэВ·Å. Для α_{SIA} вклад интерфейса является основным. Конкретные цифры могут измениться при учете эффекта непараболичности.

Полученные выше результаты строго применимы лишь в пределе непроницаемого гетеробарьера. Важно отметить, что данное приближение приводит к разрывности однозонных ОФ на интерфейсе. Причина этого состоит в непертурбативном влиянии интерфейсного потенциала. Именно поэтому использованный подход позволяет описать, например, мелкие таммовские состояния даже в однозонном приближении [15–17].

В литературе чаще всего используется непрерывность однозонных ОФ на гетероинтерфейсе. Теория обычно строится в рамках "двусторонних" ГУ, когда существенно проникновение под барьер [3–5, 9, 32], и не претендует на описание таммовских состояний. Поэтому прямое сравнение наших результатов с известными затруднено. Так, интерфейсные спиновые вклады, рассмотренные с использованием метода ОФ во всем пространстве в обзоре [9] (см. также (2.120) в [5]), исчезают при формальном занулении подбарьерных функций. В работе [33] особый микроскопический механизм, связанный с перемешиванием ОФ легких и тяжелых дырок на атомарно резком гетероинтерфейсе [34], был обобщен на зону проводимости. Соответствующий спиновый вклад в 3D-гамильтониан имеет структуру типа Дрессельхауза, но сингулярен в координатном пространстве. Усреднение этой сингулярности также приводит к исчезновению интерфейсного вклада в пределе непроницаемого барьера.

Вместе с тем реальные гетеробарьеры всегда конечны по высоте. Например, подбарьерная длина (13 Å) для структуры $GaAs/Al_{0.3}Ga_{0.7}As$ не очень и мала по сравнению с параметром нашей теории ($R = 20$ Å). Даже слабое просачивание под барьер, где знак g-фактора изменяется, может заметно [22] повлиять на значение извлеченных из эксперимента параметров. Этот вопрос требует особого рассмотрения.

Авторы благодарны И.В. Кукушкину за детальные обсуждения экспериментальных результатов, стимулировавшие постановку данной задачи, а также Е.Л. Ивченко, М.М. Глазову и А.В. Щепетильникову за полезные замечания. Работа частично поддержана грантом РФФИ # 11-02-01290.

1. F. Malcher, G. Lommer, and U. Rossler, Superlatt. Microstruct. **2**, 267 (1986).
2. М. И. Дьяконов, В. Ю. Кочаровский, ФТП **20**, 178 (1986).
3. R. Winkler, *Spin-orbit Coupling Effects in Two-dimensional Electron and Hole Systems*, Springer, Berlin, 2003.
4. E. I. Ivchenko and G. E. Pikus, *Superlattices and other heterostucture*, Springer, Berlin, 1995.
5. E. L. Ivchenko, *Optical Spectroscopy of Semiconductor Nanostructures*, Alpha Science, Harrow, UK, 2005.
6. Ю. А. Бычков, Е. И. Рашба, Письма в ЖЭТФ **39**, 66 (1984).
7. E. I. Rashba and V. I. Sheka, in: *Landau Level Spectroscopy* (ed. by G. Landwehr and E. I. Rashba), North-Holland, Amsterdam, 1991, p. 131.
8. L. Leibler, Phys. Rev. B **16**, 863 (1977).
9. W. Zawadzki and P. Pfeffer, Semicond. Sci. Technol. **19**, R1 (2004).
10. B. A. Foreman, Phys. Rev. B **72**, 165345 (2005).
11. Э. Е. Тахтамиров, В. А. Волков, ЖЭТФ **116**, 1843 (1999).
12. A. V. Rodina, A. Yu. Alekseev, A. L. Efros et al., Phys. Rev. B **65**, 125302 (2002).
13. E. E. Takhtamirov and V. A. Volkov, Semicond. Sci. Technol. **12**, 77 (1997).
14. E. Takhtamirov and R. V. N. Melnik, New J. Phys. **12**, 123006 (2010).
15. В. А. Волков, Т. Н. Пинскер, ЖЭТФ **70**, 2268 (1976).
16. В. А. Волков, Т. Н. Пинскер, ЖЭТФ **72**, 1087 (1977).
17. V. A. Volkov and T. N. Pinsker, Surf. Sci. **81**, 181 (1979).
18. Ф. Т. Васько, Письма в ЖЭТФ **30**, 574 (1979).
19. A. V. Rodina and A. Yu. Alekseev, Phys. Rev. B **73**, 115312 (2006).
20. L. M. Roth, Phys. Rev. **118**, 1534 (1960).
21. В. К. Калевич, В. Л. Коренев, Письма в ЖЭТФ **5**, 1759 (1992).
22. Е. Л. Ивченко, А. А. Киселев, ФТП **26**, 1471 (1992).
23. В. К. Калевич, В. Л. Коренев, Письма в ЖЭТФ **57**, 557 (1993).
24. Yu. A. Nefyodov, A. V. Shchepetilnikov, I. V. Kukushkin et al., Phys. Rev. B **83**, 041307 (2011).
25. Yu. A. Nefyodov, A. V. Shchepetilnikov, I. V. Kukushkin et al., Phys. Rev. B **84**, 233302 (2011).
26. E. O. Kane, Phys. Chem. Solids. **1**, 249 (1957).
27. U. Rössler, Solid State Comm. **49**, 943 (1984).
28. H. Mayer and U. Rössler, Phys. Rev. B **44**, 9048 (1991).
29. P. Pfeffer and W. Zawadzki, Phys. Rev. B **41**, 1561 (1990).
30. В. А. Волков, Т. Н. Пинскер, ФТТ **23**, 1756 (1981).
31. G. M. Luttinger and W. Kohn, Phys. Rev. **97**, 869 (1955).
32. J. Fabian, A. Matos-Abiaguea, C. Ertlera et al., Acta Physica Slovaca **57**, 565 (2007).
33. U. Rössler and J. Kainz, Solid State Comm. **121**, 313 (2002).
34. E. L. Ivchenko, Y. A. Kaminski, and U. Rössler, Phys. Rev. B **54**, 5852 (1996).