Письма в ЖЭТФ, том 30, вып. 9, стр. 574 – 577 *5 ноября 1979 г.*

СПИНОВОЕ РАСЩЕПЛЕНИЕ СПЕКТРА ДВУМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОНОВ, ОБУСЛОВЛЕННОЕ ПОВЕРХНОСТНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ

Ф.Т.Васько

Рассмотрено спиновое расщепление спектра двумерных электронов (таммовского состояния, квантованной пленки и инверсионного слоя), обусловленное взаимодействием с короткодействующим потенциалом поверхности. Расчет выполнен для изотропного приближения эффективной массы.

Динамика электрона проводимости ограниченного полупроводника описывается в $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$-приближении уравнением

$$(\hat{\epsilon} + \hat{\mathbf{v}}\cdot\mathbf{p})\psi_\lambda = E_\lambda \psi_\lambda , \tag{1}$$

дополненным на короткодействующем (толщиной порядка постоянной решетки a) поверхностном потенциале граничными условиями для набора огибающих ψ_λ. Полная волновая функция электрона обычным образом [1] выражается через столбец ψ_λ. Граничное условие для ψ_λ получено ниже в приближении эффективной массы для идеальной поверхности (заданной уравнением $z = z_0$) из требования

$$\int d^2x \{ \psi_\lambda^+ \hat{v}_z \psi_\nu + (\hat{v}_z \psi_\lambda)^+ \psi_\nu \}|_{z = z_0} = 0, \tag{2}$$

обеспечивающего самосопряженность задачи (1). Такой подход соответствует методу потенциала нулевого радиуса [2] и использовался при выводе бесспинового граничного условия [3]. В (1, 2) $\mathbf{p}$ – оператор импульса, диагональная матрица $\hat{\epsilon}$ определяет положение экстремумов зон, $\hat{\mathbf{v}}$ – недиагональная по номеру зоны матрица скорости; эффективную массу m считаем малой по сравнению с массой свободного электрона.

Когда энергия E_λ близка к экстремуму зоны проводимости ϵ_c (ниже $\epsilon_c = 0$) и в многокомпонентной функции ψ_λ велик лишь спинор $\phi_\lambda^{(c)}$, гамильтониан в (1) преобразованием $\psi_\lambda = e^{\hat{S}} \phi_\lambda$ (явный вид оператора $\hat{S}$ см. [1]) приводится к форме $p^2/2m$, а условие (2) оказывается зависящим от спина

$$\int d^2x \{ \phi_\lambda^{(c)+} (p_z/m + \sum_i \hat{\beta}_{zi}\, p_i)\phi_\nu^{(c)} + [(p_z/m + \sum_i \hat{\beta}_{zi}\, p_i)\phi_\lambda^{(c)}]^+ \phi_\lambda^{(c)} \}|_{z = z_0} = 0 \tag{3}$$

через тензор

$$\hat{\beta}_{zi} = \sum_n \frac{v_{cn}^z v_{nc}^i - v_{cn}^i v_{nc}^z}{\epsilon_c - \epsilon_n} . \tag{4}$$

Тензор (4), определяющий g-фактор электрона проводимости [1, 4], получается из антикоммутатора $\hat{v}_z\hat{S} + \hat{S}\hat{v}_z$, возникающего при подстановке разложения $\psi_\lambda = (1 + \hat{S}_{\parallel})\phi_\lambda$ в (2). Компоненты (4) выражаются через спиновые матрицы

$$\beta_{zi} = \frac{\chi}{2m}(\sigma_z\sigma_i - \sigma_i\sigma_z), \tag{5}$$

причем коэффициент χ равен отношению спинового расщепления электронного спектра в магнитном поле к диамагнитному и мал в случае слабого спин-орбитального взаимодействия. Для кейновской модели зонного спектра в пределе большого спин-орбитального расщепления (такой случай реализуется в InSb) $\chi = 1/2$, а для дираковской модели (используемой при описании электронного спектра халькогенидов свинца [5] и висмута [6]) $\chi = 1$, т. е. в ряде материалов спиново-зависящее взаимодействие с поверхностью не мало.

В случае трансляционно-инвариантной поверхности $\phi_\lambda^{(c)} = \bar{\phi}_\lambda|\mathbf{p}_\parallel>$, где $|\mathbf{p}_\parallel>$ — двумерная плоская волна, а для зависящего от координаты z спинора $\bar{\phi}_\lambda$ из (3) получается набор условий ($\mathbf{p}_\parallel$ и $\mathbf{p}'_\parallel$ — двумерные импульсы соответствующие состояниям λ и ν, $\mathbf{e}_z$ — орт вдоль оси OZ)

$$\delta_{\mathbf{p}_\parallel \mathbf{p}^*_\parallel}\{\bar{\phi}^+_\lambda(p_z + i\chi\vec{\sigma}[\mathbf{e}_z\times\mathbf{p}_\parallel])\bar{\phi}_\nu + [(p_z + i\chi\vec{\sigma}[\mathbf{e}_z\times\mathbf{p}_\parallel])\bar{\phi}_\lambda]^+\bar{\phi}_\nu\}|_{z=z_0} = 0. \tag{6}$$

Диагонализуя (6) по спину [7] получаем $\bar{\phi}_\lambda = \exp[i^\pi/_4(\sigma_x\cos\phi + \sigma_y\sin\phi)]\times\theta_\lambda|\Sigma>$, где $\mathbf{p}_\parallel = (p_\parallel\cos\phi, p_\parallel\sin\phi)$, $|\Sigma>$ — собственная функция оператора σ_z ($\sigma_z|\Sigma> = \Sigma|\Sigma>$, квантовое число $\Sigma = \pm1$ определяет проекцию спина на ось перпендикулярную $p_\parallel$). Скалярная функция θ_λ удовлетворяет уравнению $\frac{p_z^2}{2m}\theta_\lambda = \left(E_\lambda - \frac{p_\parallel^2}{2m}\right)\theta_\lambda$ с граничным условием для логарифмической производной на поверхности

$$(p_z + i\chi\Sigma p_\parallel + ip_0)\theta_\lambda|_{z=z_0} = 0. \tag{7}$$

При переходе от билинейной формы (6) к (7) аналогично [3] появится не зависящий от квантовых чисел λ[1)] импульс p_0, характеризующий свойства поверхности. Этот импульс здесь не связан явно с поверхностным потенциалом и должен определяться из экспериментальных данных.

Спиново-зависящее взаимодействие с плавным (на расстояниях порядка a) внешним полем имеет вид спин-орбитального слагаемого [8] и приводит к малым (по параметру $\bar{E}/\epsilon_g$, $\bar{E}$ — характерная энергия электрона проводимости, ϵ_g — ширина запрещенной зоны) эффектам. Принципиальное отличие (7) от результатов для плавного поля состоит в том,

---

[1)] Из-за фактора $\delta_{\mathbf{p}_\parallel \mathbf{p}'_\parallel}$ в (6) p_0 может зависеть от $p_\parallel$. Поскольку поверхностный потенциал короткодействующий, такая зависимость мала по параметру $p_\parallel a/\hbar$. Зависимость p_0 от Σ несущественна из-за инвариантности задачи относительно операции обращения времени при $p_\parallel = 0$.

что короткодействующий потенциал (аналогично постоянному магнитному полю) изменяет спиновое состояние электронов проводимости и в "нерелятивистском" предельном случае $\overline{E}/\epsilon_g \to 0$. Ниже находится спиновое расщепление спектра движущихся ($p_{\|} \neq 0$) электронов, локализованных у поверхности описываемой (7).

Решение для "мелкого" таммовского состояния на поверхности $z_o = 0$ получим дополнив задачу граничным условием $\theta_\lambda|_{z\to+\infty} = 0$. Закон дисперсии таммовского состояния $E_{p\|\Sigma}$ и глубина его локализации $K^{-1}_{p_{\|}\Sigma}$ ($\theta_\lambda \sim e^{-K_{p\|\Sigma} z}$) даются формулами

$$E_{p_{\|}} \Sigma = -\frac{(\hbar K_{p_{\|}\Sigma})^2}{2m} + \frac{p_{\|}^2}{2m}, \quad \hbar K_{p_{\|}\Sigma} = p_o + \chi \Sigma p_{\|}, \tag{8}$$

а область существования определяется условием $p_o + \chi\Sigma p_{\|} > 0$. Полученный спектр (как и рассмотренные ниже) линеен при малых $p_{\|}$, что приводит (аналогично трехмерному случаю [9]) к возникновению петли экстремумов, которая велика при $\chi \sim 1$. Для дираковской модели спектр (8) линеен по $p_{\|}$; переход на квадратичный спектр обеспечивается опущенным в (1) вкладом далеких зон.

При исследовании размерного квантования в пленке толщины d граничные условия (7) ставятся на обеих поверхностях (характерные импульсы обозначаем $p_\pm$). Закон дисперсии дается формулой $E_\lambda = [(\hbar K_\lambda)^2 + p_{\|}^2]/2m$, где K_λ определяется уравнением

$$\mathrm{ctg}\, K_\lambda d = \frac{p_+ p_- - (\chi p_{\|})^2 - \chi \Sigma p_{\|}(p_+ - p_-)}{\hbar K_\lambda (p_+ + p_-)} - \frac{\hbar K_\lambda}{p_+ + p_-}. \tag{9}$$

Когда правая часть (9) велика решения близки к квазиклассическим ($K_\lambda d \approx n\pi$) и слабо расщеплены по спину. Спиновое расщепление не мало лишь для области $\hbar\overline{K} \sim \sqrt{p_+ p_-}$ (при малом $p_{\|}$), где не работает квазиклассическое приближение. Оценка величины $\Delta K = |K_{\Sigma=+1} - K_{\Sigma=-1}|$ получается в виде

$$\hbar \Delta K \sim \frac{\mathrm{const}}{\overline{K} d} \chi p_{\|} \frac{p_+ - p_-}{p_+ + p_-} \tag{10}$$

причем для симметричной пленки расщепление отсутствует; в антисимметричном случае ($p_+ = -p_-$) решения всегда квазиклассические. Мнимый корень (9) описывает изменение спектра таммовского состояния в пленке.

Для электрона в инверсионном слое безразмерная энергия ϵ_λ ($\epsilon_\lambda = \left(E_\lambda - \frac{p_{\|}^2}{2m}\right) \Big/ \frac{(\hbar/l)^2}{2m}$, характерная длина l определена как $l^{-3} = -\frac{2meE_s}{\hbar^3}$, $e < 0$, E_s — однородное приповерхностное поле) определяется дисперсионным уравнением

$$\frac{p_o + \chi\Sigma\, p_{\parallel}}{\hbar/l} Ai\,(-\epsilon_\lambda) - Ai\,'(-\epsilon_\lambda) = 0. \qquad (11)$$

В квазиклассической области энергий $\epsilon_\lambda >> 1$ использование асимптотики функции Эйри $Ai\,(x)$ позволяет оценить малое спиновое расщепление уровня $\Delta\epsilon \approx \frac{\text{const}}{\sqrt{\epsilon_\lambda}} \frac{\chi p_{\parallel}}{\hbar/l}$. Для сильно связанного таммовского состояния $\epsilon_\lambda << -1$ получается результат (8). При $|\epsilon_\lambda| \sim 1$ порядок величины спинового расщепления определяется параметром $\chi p_{\parallel} /(\hbar/l)$.

Численное решение дисперсионных уравнений (9, 11) позволит рассчитать аналогичные [10] особенности спектров поглощения электромагнитного излучения, обусловленные спиновым расщеплением. Область отрицательных эффективных масс $\left(\frac{d^2E_\lambda}{dp_{\parallel}^2} < 0\right)$ велика при большом радиусе петли экстремумов. Поэтому в материалах с $\chi \sim 1$ возможны аномалии коллективных и кинетических эффектов на двумерных электронах.

Институт полупроводников
Академии наук Украинской ССР

Поступила редакцию
1 августа 1979 г.

Литература

[1] J.M.Luttinger, W.Kohn. Phys. Rev., 97, 869, 1955; Дж. Каллуэй. Теория энергетической зонной структуры М., изд. Мир, 1969, гл. 4.

[2] А.И.Базь, Я.Б.Зельдович, А.М.Переломов. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М., изд. Наука, 1971, стр. 26, 513.

[3] V.A.Volkov, T.N.Pinsker. Surf. Sci., 81, 181, 1979.

[4] Е.М.Лифшиц, Л.П.Питаевский. Статистическая физика, М., изд. Наука, 1978, § 59.

[5] Yu.I.Ravich, B.A.Efimova, V.I.Tamarchenko. Phys. Stat. Sol., (b) 43, 11, 453, 1971.

[6] Л.А.Фальковский. УФН, 94, 3, 1968.

[7] Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Квантовая механика, ФМ, 1963, § 58.

[8] С.Т.Павлов, Ю.А.Фирсов. ФТТ, 9, 1780, 1967; В.Н.Абакумов, И.Н.Яссиевич. ЖЭТФ, 61, 2571, 1971.

[9] Э.И.Рашба, В.И.Шека. ФТТ, 1, Сб. статей II, 162, 1959.

[10] Ф.Т.Васько, Н.А.Прима. ФТТ, 21, 1734, 1979.