

Эффекты спин-орбитального взаимодействия в полупроводниках.

Конспект лекций для аспирантов

М. М. Глазов

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе

Краткий конспект лекций для аспирантов, прочитанных в рамках курсов “Физика полупроводников” и “Физика конденсированного состояния”. В тексте возможны опечатки и неточности. Также приведен список литературы, по гиперссылкам доступны полные тексты статей и книг. Основные источники:

- Сборник под редакцией Б.П. Захарчени и Ф. Мейера, *Оптическая ориентация* [1];
- Сборник под редакцией М.И. Дьяконова, *Spin physics in Semiconductors* [2];
- М.М. Glazov, *Electron & Nuclear Spin Dynamics in Semiconductor Nanostructures* [3].

I. СЛОЖНАЯ СТРУКТУРА ВАЛЕНТНОЙ ЗОНЫ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ С РЕШЕТКОЙ АЛМАЗА И ЦИНКОВОЙ ОБМАНКИ. ГАМИЛЬТониАН ЛАТТИНЖЕРА

Состояния вершины валентной зоны наиболее распространенных кубических полупроводников (Si, Ge, GaAs, InAs, InSb и т.п.) формируются из атомных орбиталей p типа. Эти блоховские амплитуды мы будем обозначать $\mathcal{X}$, $\mathcal{Y}$, $\mathcal{Z}$. Они преобразуются по неприводимому представлению F_2 (Γ_{15} точечной группы T_d), см. таблицу I. Для удобства вводится вектор $\mathbf{R}$ с компонентами $\mathcal{X}$, $\mathcal{Y}$ и $\mathcal{Z}$. С учетом спина, но в пренебрежении спин-орбитальным взаимодействием состояния в центре зоны Бриллюэна шестикратно вырождены, соответствующие базисные функции запишем в виде $\mathbf{R}_i | \uparrow \rangle = \alpha \mathbf{R}_i$, $\mathbf{R}_i | \downarrow \rangle = \beta \mathbf{R}_i$ ($i = x, y, z$). Здесь введены спиновые столбцы $\alpha = | \uparrow \rangle$, $\beta = | \downarrow \rangle$, которые преобразуются по представлению Γ_6 группы T_d . Прямое произведение

$$\Gamma_{15} \otimes \Gamma_6 = \Gamma_7 \oplus \Gamma_8 \quad (1)$$

приводимо, поэтому шестикратное вырождение вершины валентной зоны снимается. Отметим, что состояния зоны проводимости в GaAs и подобных полупроводниках формируется атомными орбиталями s типа. В Γ -точке орбитальные блоховские амплитуды отвечают представлению Γ_1 , а произведение $\Gamma_1 \otimes \Gamma_6 = \Gamma_6$. Дно зоны проводимости двукратно вырождено по спину.

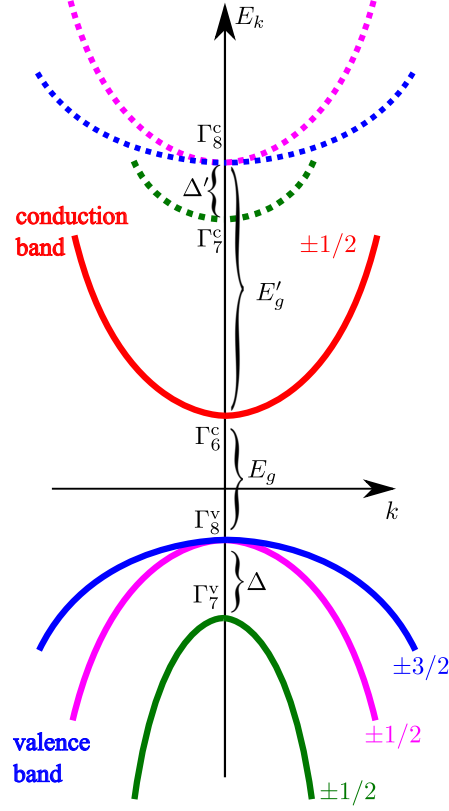


Рис. 1. Схема зон в объемном GaAs.

Как хорошо известно из атомной физики шестикратное вырождение p состояний снимается при учете спин-орбитальной связи. На микроскопическом уровне этот эффект описывается в рамках уравнения Шредингера-Паули, причем вклад в гамильтониан, описывающий спин-орбитальное взаимодействие, можно представить для свободного электрона в виде

$$-\frac{e\hbar}{4m_0^2c^2}\boldsymbol{\sigma}[\mathbf{E} \times \mathbf{p}], \quad (2)$$

где m_0 – масса свободного электрона, c – скорость света в вакууме, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ вектор, составленный из матриц Паули (оператор спина электрона $\mathbf{s} = \boldsymbol{\sigma}/2$), $e\mathbf{E} = -\partial V(\mathbf{r})/\partial \mathbf{r}$ – электрическое поле, действующее на электрон, $V(\mathbf{r})$ – периодический потенциал решетки.

Расчет для электронов в полупроводниках с кубической решеткой показывает, что гамильтониан спин-орбитального взаимодействия, действующий на блоховские амплитуды $\alpha \mathbf{R}_i$, $\beta \mathbf{R}_j$, можно представить в виде, аналогичном атомному:

$$\mathcal{H}_{SO} = \frac{2\Delta}{3}(\mathbf{s} \cdot \mathbf{L}) = \frac{\Delta}{3}(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{L}), \quad (3)$$

Таблица I. Неприводимые представления точечной группы T_d .Используются кубические оси $x \parallel [100], y \parallel [010], z \parallel [001]$.

Представления (общие)	Название в Γ точке	Базисные функции
A_1 (скаляр)	Γ_1	$1; x^2 + y^2 + z^2; xyz$ $\mathbf{A} \cdot \mathbf{C}$
A_2 (псевдоскаляр)	Γ_2	$x^4(y^2 - z^2) + y^4(z^2 - x^2) + z^4(x^2 - y^2)$ $\mathbf{A} \cdot (\mathbf{C} \times \mathbf{D})$
E	Γ_{12}	$\sqrt{3}(x^2 - y^2), 2z^2 - x^2 - y^2$
F_1 (псевдовектор)	Γ_{25}	$x(y^2 - z^2), y(z^2 - x^2), z(x^2 - y^2)$ $(J_x, J_y, J_z); \mathbf{A} \times \mathbf{C}$
F_2 (вектор)	Γ_{15}	$(x, y, z); (yz, zx, xy)$ $(A_x, A_y, A_z); (\{J_x(J_y^2 - J_z^2)\}_s, \{J_y(J_z^2 - J_x^2)\}_s, \{J_z(J_x^2 - J_y^2)\}_s)$
$D_{1/2}$ (спинор 1/2)	Γ_6	$ \uparrow\rangle, \downarrow\rangle$
	Γ_7	$ \Gamma_7, +1/2\rangle, \Gamma_7, -1/2\rangle$
$D_{3/2}$ (спинор 3/2)	Γ_8	$ \Gamma_8, J_z\rangle, J_z = -3/2, \dots, 3/2$

где Δ – некоторая константа, а оператор $\mathbf{L}$ действует на функции $\mathcal{X}$, $\mathcal{Y}$ и $\mathcal{Z}$ также как оператор орбитального момента на функции x , y и z . Как можно увидеть из непосредственной диагонализации гамильтониана (3) эта константа равна расщеплению состояний с различным значением полного момента.

Собственные функции вершины валентной зоны можно установить не прибегая к диагонализации гамильтониана (3). Действительно, нетрудно провести полную аналогию между состояниями вершины валентной зоны и состояниями частицы, описываемой орбитальным моментом $L = 1$ и спиновым $S = 1/2$. При учете спин-орбитальной связи состояния системы должны характеризоваться полным моментом системы $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ и его проекцией на данную ось, которую обозначим z . По правилу сложения моментов имеем четыре вырожденных состояния с полным моментом $J = 3/2$ и его проекцией на ось z $J_z = 3/2, 1/2, -1/2, -3/2$. Эти состояния относятся к представлению Γ_8 группы симметрии T_d . Кроме этого, есть еще два вырожденных состояния, описываемых полным моментом $J = 1/2$ и его проекцией $J_z = \pm 1/2$. Эти состояния относятся к представлению Γ_7 . Расщепление между квартетом и дублетом и

есть константа Δ .

Теперь легко записать волновые функции электрона в вершине валентной зоны. Как известно из квантовой механики

$$\Psi_{J,J_z} = \sum_{l_z, s_z} C_{ll_z, ss_z}^{JJ_z} \Psi_{ll_z}^{(1)} \Psi_{ss_z}^{(2)}. \quad (4)$$

Здесь функции $\Psi_{ll_z}^{(1)}$ и $\Psi_{ss_z}^{(2)}$ описывают орбитальную и спиновые части полной волновой функции, а $C_{ll_z, ss_z}^{JJ_z}$ – коэффициенты Клебша-Гордана. В нашем случае спиновые функции есть столбцы $\alpha = \Psi_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{(2)}$, $\beta = \Psi_{\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}}^{(2)}$, а орбитальные функции соответствующие заданным проекциям момента выбираются в виде (канонический базис):

$$\Psi_{1,1}^{(1)} = -\frac{\mathcal{X} + i\mathcal{Y}}{\sqrt{2}}, \quad \Psi_{1,-1}^{(1)} = \frac{\mathcal{X} - i\mathcal{Y}}{\sqrt{2}}, \quad \Psi_{1,0}^{(1)} = \mathcal{Z}. \quad (5)$$

Базисные функции вершины валентной зоны имеют вид

$$|\Gamma_8, +3/2\rangle = -\frac{\mathcal{X} + i\mathcal{Y}}{\sqrt{2}} |\uparrow\rangle, \quad (6a)$$

$$|\Gamma_8, +1/2\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} \mathcal{Z} |\uparrow\rangle - \frac{\mathcal{X} + i\mathcal{Y}}{\sqrt{6}} |\downarrow\rangle, \quad (6b)$$

$$|\Gamma_8, -1/2\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} \mathcal{Z} |\downarrow\rangle + \frac{\mathcal{X} - i\mathcal{Y}}{\sqrt{6}} |\uparrow\rangle, \quad (6c)$$

$$|\Gamma_8, -3/2\rangle = \frac{\mathcal{X} - i\mathcal{Y}}{\sqrt{2}} |\downarrow\rangle, \quad (6d)$$

а для спин-орбитально отщепленной зоны –

$$|\Gamma_7, +1/2\rangle = -\frac{1}{\sqrt{3}} [\mathcal{Z} |\uparrow\rangle + (\mathcal{X} + i\mathcal{Y}) |\downarrow\rangle], \quad (7a)$$

$$|\Gamma_7, -1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}} [\mathcal{Z} |\downarrow\rangle - (\mathcal{X} + i\mathcal{Y}) |\uparrow\rangle]. \quad (7b)$$

Формализм углового момента удобно использовать и для исследования спектра дырок вблизи вершины валентной зоны. Сосредоточимся на случае, когда Δ превосходит все остальные энергии в системе, тогда состояния Γ_8 и Γ_7 можно рассматривать независимо. Особый интерес представляют четырехкратно вырожденные состояния Γ_8 . Их эффективный гамильтониан можно построить, комбинируя компоненты волнового вектора $\mathbf{k}$ и матрицы J_x, J_y, J_z [$\mathbf{J} = (J_x, J_y, J_z)$] момента 3/2. В дальнейшем будем рассматривать сферически-симметричную модель. Тогда допустимы две инвариантные комбинации $k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$ и $(\mathbf{k} \cdot \mathbf{J})^2$. Эффективный гамильтониан (гамильтониан Латтинжера в сферическом приближении) записывается в виде:

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \left(\gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma_2 \right) + \frac{\hbar^2 \gamma_2}{m_0} (\mathbf{k} \cdot \mathbf{J})^2, \quad (8)$$

где γ_1, γ_2 – параметры, m_0 – масса свободного электрона. Можно переписать этот гамильтониан в виде, содержащем комбинации $k_x^2 J_x^2 + \dots$ и $k_x k_y \{J_x, J_y\}_s + \dots$, чтобы сравнить с общим случаем, в котором учитывается гофрировка спектра валентной зоны, где $\{A, B\}_s = (AB + BA)/2$. Действительно, анализ показывает, что в группе симметрии T_d допустимы три вклада в эффективный гамильтониан:

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \left(\gamma_1 + \frac{5}{2} \gamma_2 \right) + \frac{\hbar^2 \gamma_2}{m_0} (k_x^2 J_x^2 + \dots) + \frac{2\hbar^2 \gamma_3}{m_0} (k_x k_y \{J_x, J_y\}_s + \dots). \quad (9)$$

Случай $\gamma_2 = \gamma_3$ отвечает сферической симметрии. В гамильтониане (9) оси x, y, z – кубические, т.е. соответствуют кристаллографическим направлениям $[100]$, $[010]$, $[001]$.

Гамильтониан (8) исключительно удобно диагонализировать при $\mathbf{k}$ направленном по оси z (при этом матрица J_z диагональна). Легко увидеть, что есть две зоны, каждая из которых двукратно вырождена. Эти зоны характеризуются определенной спиральностью – проекцией полного момента на направление $\mathbf{k}$:

$$E_{hh} = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_{hh}}, \quad \frac{m_0}{m_{hh}} = \gamma_1 - 2|\gamma_2| \quad \text{— тяжелые дырки, спиральность } \pm 3/2, \quad (10)$$

$$E_{lh} = -\frac{\hbar^2 k^2}{2m_{lh}}, \quad \frac{m_0}{m_{lh}} = \gamma_1 + 2|\gamma_2| \quad \text{— легкие дырки, спиральность } \pm 1/2. \quad (11)$$

Волновые функции – суть столбцы, соответствующие заданной проекции J_z .¹ Дисперсия валентных зон представлена на рис. 2

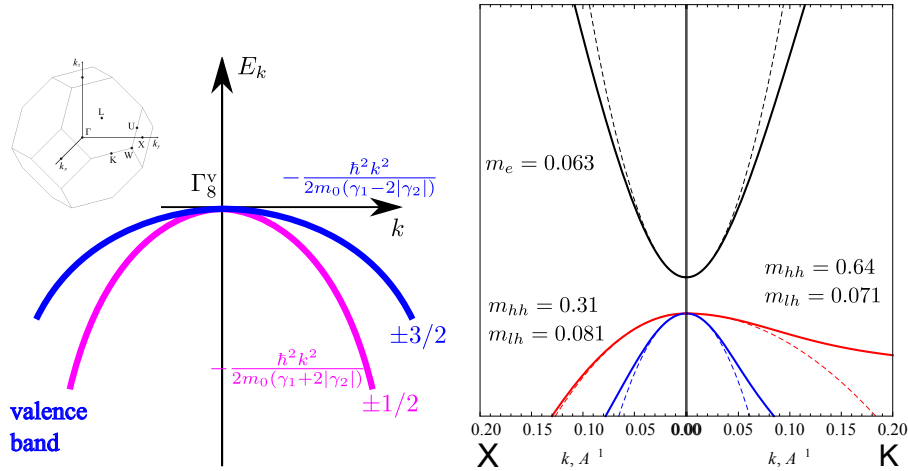


Рис. 2. Схематическая дисперсия тяжелых и легких дырок (левая панель), результаты расчета в рамках 14-зонной модели с учетом гофрировки (правая панель), величины масс носителей заряда (в единицах массы свободного электрона m_0) немного отличаются от общепринятых, например, в эксперименте $m_e = 0.067m_0$.

¹ Уравнения (8), (10) и (11) приведены в электронном представлении. Считается, что $\gamma_1 > 0$, классификация по проекции момента соответствует случаю $\gamma_2 > 0$

Приведем выражения для матриц $\mathbf{J}$:

$$J_x = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{3}/2 & 0 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \sqrt{3}/2 \\ 0 & 0 & \sqrt{3}/2 & 0 \end{bmatrix}, \quad J_y = \begin{bmatrix} 0 & -i\sqrt{3}/2 & 0 & 0 \\ i\sqrt{3}/2 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & -i\sqrt{3}/2 \\ 0 & 0 & i\sqrt{3}/2 & 0 \end{bmatrix},$$

$$J_z = \begin{bmatrix} 3/2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -3/2 \end{bmatrix}.$$

Подробный анализ энергетических зон в кристаллах, роли спин-орбитального взаимодействия, изложение $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -метода теории возмущений можно найти в книге Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус, *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках*, М. Наука (1972) [4].

II. g -ФАКТОР ЭЛЕКТРОНА В ПОЛУПРОВОДНИКЕ. ФОРМУЛА ЛОРЫ РОТ

В общем случае гамильтониан взаимодействия спина электрона с магнитным полем записывают в виде

$$\mathcal{H}_B = \frac{1}{2}\mu_B \sum_{\alpha\beta} \sigma_\alpha g_{\alpha\beta} B_\beta. \quad (12)$$

Здесь $\mu_B = |e|\hbar/(2m_0c)$ – магнетон Бора, σ_α – матрицы Паули, $g_{\alpha\beta}$ – тензор g -факторов электрона (факторов Ланде), греческие индексы α, β нумеруют декартовы координаты x, y, z . Мы будем рассматривать прямозонные полупроводники с решеткой цинковой обманки (например, GaAs) и изучать эффект Зеемана в зоне проводимости Γ_6 . Такие системы имеют кубическую симметрию, поэтому тензор g -факторов сводится к скаляру

$$g_{\alpha\beta} = g\delta_{\alpha\beta}.$$

Для свободного электрона в вакууме $g_0 = 2$. В полупроводниках (как будет показано ниже) величина g -фактора может существенно отличаться от g_0 по тем же причинам, что эффективная масса электрона отличается от массы свободного электрона. Для расчета g -фактора воспользуемся $\mathbf{k}\mathbf{p}$ -теорией возмущений. В рамках второго порядка этого метода получаем эффективный гамильтониан

$$\mathcal{H}_{ss'}(\mathbf{K}) = \frac{\hbar^2 K^2}{2m_0} \delta_{ss'} + \frac{1}{2}g_0\mu_B \boldsymbol{\sigma}_{ss'} \mathbf{B} + \sum_{n \neq c} \frac{H_{sn} H_{ns'}}{E_c - E_n}, \quad (13)$$

где мы явно выделили спиновые индексы, s обозначает (орбитальные) состояния в зоне проводимости, n нумерует все остальные зоны (с учетом спина). Величина

$$\mathbf{K} = -i\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} - \frac{e}{c\hbar} \mathbf{A}(\mathbf{r}),$$

Таблица II. Матричные элементы оператора импульса $\mathbf{e} \cdot \mathbf{p}_{cs,vm}$ в единицах $p_{cv}/\sqrt{2}$, $e_{\pm} = e_x \pm ie_y$.

	$\Gamma_8, 3/2$	$\Gamma_8, 1/2$	$\Gamma_8, -1/2$	$\Gamma_8, -3/2$	$\Gamma_7, 1/2$	$\Gamma_7, -1/2$
$\Gamma_6, 1/2$	$-e_+$	$2e_z/\sqrt{3}$	$e_-/\sqrt{3}$	0	$-e_z/\sqrt{3}$	$-2e_-/\sqrt{3}$
$\Gamma_6, -1/2$	0	$-e_+/\sqrt{3}$	$2e_z/\sqrt{3}$	e_-	$-2e_+/\sqrt{3}$	$e_z/\sqrt{3}$

где $\mathbf{A}$ – векторный потенциал внешнего магнитного поля, а

$$H_{sn} = \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{K} \cdot \mathbf{p}_{cs,n},$$

$\mathbf{p}_{cs,n}$ – междузонные матричные элементы импульса.

В уравнении (13) принципиально важным оказывается порядок сомножителей в последнем слагаемом. Действительно, в присутствии внешнего магнитного поля компоненты обобщенного волнового вектора K_{α} , K_{β} не коммутируют:

$$K_{\alpha}K_{\beta} - K_{\beta}K_{\alpha} = \frac{ie}{\hbar c} \sum_{\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} B_{\gamma}, \quad (14)$$

где $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ – абсолютно антисимметричный псевдотензор третьего ранга (символ Леви-Чевиты). Выделим в уравнении (13) линейные по $\mathbf{B}$ вклады и получим гамильтониан, описывающий эффект Зеемана в рамках $\mathbf{k}\mathbf{p}$ -теории возмущений:

$$\mathcal{H}_{B,ss'} = \frac{1}{2} g_0 \mu_B \boldsymbol{\sigma}_{ss'} \cdot \mathbf{B} - \frac{i\mu_B}{m_0} \sum_{n \neq c} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \frac{p_{cs,n}^{\alpha} p_{n,cs'}^{\beta}}{E_c - E_n} B_{\gamma}. \quad (15)$$

В этом выражении и в формулах ниже суммирование по дважды повторяющимся греческим индексам опущено. Отметим, что конструкцию $\epsilon_{\alpha\beta\gamma} p_{cs,n}^{\alpha} p_{n,cs'}^{\beta} B_{\gamma}$ можно представить в виде $[\mathbf{p}_{cs,n} \times \mathbf{p}_{n,cs'}] \cdot \mathbf{B}$. Ко второму члену в выражении (15) можно придти и другим образом, вычислив “диагональный” матричный элемент оператора $\mathbf{L} \cdot \mathbf{B}$ (где $\mathbf{L} = \hbar^{-1}[\mathbf{r} \times \mathbf{p}]$ – оператор углового момента) на блоховских функциях данной зоны и воспользовавшись соотношением полноты базиса и связью между матричными элементами оператора координаты и импульса.

В кубическом полупроводнике для зоны проводимости эффект Зеемана изотропен, поэтому достаточно рассмотреть геометрию, где $\mathbf{B} \parallel z$, и рассчитать сдвиг спинового уровня с $s = +1/2$, $\mathcal{H}_{1/2,1/2}$. Мы будем использовать простейшую модель, учитывая только зону проводимости (состояния, относящиеся к представлению Γ_6 группы T_d) и валентную зону (Γ_8 и Γ_7), см. рис. 1. Воспользуемся таблицей II матричных элементов оператора импульса для расчета g -фактора электрона в полупроводнике типа GaAs:

$$\mathcal{H}_{1/2,1/2} = \left(\frac{\hbar}{m_0} \right)^2 \sum_{n=|\Gamma_8, \pm 3/2\rangle, |\Gamma_8, \pm 1/2\rangle, |\Gamma_7, \pm 1/2\rangle} \frac{(\mathbf{K}\mathbf{p})_{1/2n} (\mathbf{K}\mathbf{p})_{n1/2}}{E_c - E_n}.$$

При суммировании достаточно оставить вклады $\propto K_x, K_y$, они приходят от состояний $|\Gamma_8, 3/2\rangle$, $|\Gamma_8, -1/2\rangle$ и $|\Gamma_7, -1/2\rangle$:

$$\mathcal{H}_{1/2,1/2} = \left(\frac{\hbar}{m_0} \right)^2 |p_{cv}|^2 \left\{ \frac{1}{E_g} \left[\frac{K_+ K_-}{2} + \frac{K_- K_+}{6} \right] + \frac{1}{E_g + \Delta} \frac{K_- K_+}{3} \right\}.$$

Заметим, что линейный по магнитному полю вклад в произведение K_+K_- , где $K_{\pm} = k_x \pm ik_y$ равен $eB_z/\hbar c$, а вклад K_-K_+ сводится к $-eB_z/\hbar c$. В результате получаем

$$g = g_0 - \frac{4}{3} \frac{|p_{cv}|^2}{m_0} \frac{\Delta}{E_g(E_g + \Delta)} + \Delta g. \quad (16)$$

Здесь E_g – ширина запрещенной зоны, Δ – спин-орбитальное расщепление валентной зоны, Δg – вклад далеких зон. Выражение (16) (а зачастую и (15)) называется формулой Лоры Рот (Laura M. Roth, Benjamin Lax, and Solomon Zwerdling, *Theory of optical magneto-absorption effects in semiconductors*, Phys. Rev. **114**, 90 (1959) [5]).

Если вовсе пренебречь далекими зонами, то оценка по формуле (16) для GaAs дает $g = -0.32$ (экспериментальное значение $g = -0.44$). В InSb имеем $g \approx -50$. Такие существенные перенормировки g -фактора по сравнению с вакуумом говорят о параметрически сильном спин-орбитальном взаимодействии в полупроводниках. Действительно, как видно из формулы (16), безразмерным параметром, определяющим перенормировку, является Δ/E_g , который в полупроводниках порядка 1.

Теория электронного g -фактора в низкоразмерных системах развита в работе Е. Л. Ивченко, А. А. Киселев, *Электронный g -фактор в квантовых ямах и сверхрешетках*, ФТП **26**, 1471 (1992) [6]. Сопоставление теории и эксперимента можно найти в I. A. Yugova, A. Greulich, D. R. Yakovlev, A. A. Kiselev, M. Bayer, V. V. Petrov, Yu. K. Dolgikh, D. Reuter, and A. D. Wieck, *Universal behavior of the electron g -factor in GaAs/Al_xGa_{1-x}As quantum wells*, Phys. Rev. B **75**, 245302 (2007) [7].

III. СПИНОВОЕ РАСЩЕПЛЕНИЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ ЗОН: ЛИНЕЙНЫЕ И КУБИЧЕСКИЕ ПО ВОЛНОВОМУ ВЕКТОРУ СЛАГАЕМЫЕ В СПЕКТРЕ

A. Объемная и структурная асимметрия. Феноменологический анализ. Примеры

Рассмотрим ограничения, налагаемые симметрией кристалла, на закон дисперсии электрона проводимости, $E_s(\mathbf{k})$. Здесь $\mathbf{k}$ – волновой вектор (квазиимпульс), s – спиновый индекс. Мы изучаем немагнитные системы, поэтому имеет место инвариантность к инверсии времени $t \rightarrow -t$. При таком преобразовании, очевидно, $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ (направление движения меняется на противоположное), $s \rightarrow -s$ (спин – аналог вращения, его направление также меняется на противоположное). Таким образом, закон дисперсии удовлетворяет требованию:

$$E_s(\mathbf{k}) = E_{-s}(-\mathbf{k}). \quad (17)$$

Из (17) следует, что каждому уровню энергии соответствует по крайней мере два состояния, это явление называется крамеровым вырождением спектра. Формула (17) верна без магнитного поля. Если рассматриваемая система центросимметрична, то $\mathbf{k}$ и $-\mathbf{k}$ связаны операцией пространственной инверсии, эта операция не затрагивает спин. Поэтому

$$E_s(\mathbf{k}) = E_{-s}(-\mathbf{k}) = E_{-s}(\mathbf{k}) \quad (\text{пространственная инверсия}), \quad (18)$$

и спектр вырожден по спину. Таким образом, спиновое вырождение электронных зон может сниматься лишь в *нецентросимметричных* средах.

Воспользуемся методом инвариантов, чтобы сконструировать эффективный гамильтониан электрона с учетом спин-орбитальной связи в нецентросимметричной системе. Такой гамильтониан есть матрица 2×2 , действующая в базисе двух спиновых состояний с $s = \pm 1/2$, компоненты которой зависят от степеней волнового вектора $\mathbf{k}$. Произвольную матрицу 2×2 можно представить в виде разложения по базисным матрицам – единичной и матрицам Паули $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$. Требование инвариантности к инверсии времени заключается в том, что матрицы σ не могут входить с четными степенями компонент волнового вектора $\mathbf{k}$ (члены типа $\sigma_i k_j^{2n}$, где n – целое, $i, j = x, y, z$, запрещены). Поэтому спин-зависимые вклады могут содержать лишь нечетные степени волнового вектора $\mathbf{k}$. Ограничившись зоной проводимости s -типа (как, например, в GaAs) и удерживая лишь низшие степени $\mathbf{k}$ можно записать:

$$\mathcal{H} = \beta_{ij} \sigma_i k_j + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \gamma_{ijkl} \sigma_i k_j k_k k_l. \quad (19)$$

Члены более высокого порядка по $\mathbf{k}$ допустимы, но мы ими интересоваться не будем. Здесь и далее сумму по повторяющимся индексам опускаем. Гамильтониан (19) можно переписать в эквивалентном виде

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{so} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \frac{\hbar}{2} (\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{\Omega}_{\mathbf{k}}), \quad (20)$$

где $\boldsymbol{\Omega}_{\mathbf{k}}$ некоторый псевдовектор, составленный из компонент волнового вектора $\mathbf{k}$, взятых в нечетных степенях. Псевдовектор $\boldsymbol{\Omega}_{\mathbf{k}}$, физический смысл которого – частота спиновой прецессии, обусловленной спин-орбитальной связью, можно записать как

$$\Omega_{\mathbf{k},i} = \frac{2}{\hbar} \beta_{ij} k_j + \frac{2}{\hbar} \gamma_{ijkl} k_j k_k k_l. \quad (21)$$

Конкретный вид псевдотензоров β, γ определяется точечной симметрией рассматриваемой системы.

- Кубические кристаллы типа Si, Ge. Точечная группа O_h , есть центр инверсии, $\boldsymbol{\Omega}_{\mathbf{k}} \equiv 0$.
- Полупроводники с решеткой цинковой обманки (типа GaAs). Точечная группа T_d . Центр инверсии отсутствует, но члены, линейные по $\mathbf{k}$ в эффективном гамильтониане зоны проводимости запрещены, $\beta_{ij} \equiv 0$. Однако, комбинации $k_x(k_y^2 - k_z^2)$, и т.п. преобразуются как компоненты псевдовектора (представление F_1 , см. таблицу I), поэтому допустим спин-зависимый вклад

$$\mathcal{H}_{so} = \gamma [\sigma_x k_x (k_y^2 - k_z^2) + \sigma_y k_y (k_z^2 - k_x^2) + \sigma_z k_z (k_x^2 - k_y^2)]. \quad (22)$$

Этот вклад был предложен Г. Дрессельхаузом (1955) и носит его имя [G. Dresselhaus, *Spin-orbit coupling effects in zinc blende structures*, Phys. Rev. **100**, 580 (1955), 8].

- Полупроводники с решеткой цинковой обманки. Валентная зона Γ_8 :

$$\mathcal{H}_{so} = \alpha [k_x \{J_x(J_y^2 - J_z^2)\}_s + k_y \{J_y(J_z^2 - J_x^2)\}_s + k_z \{J_z(J_x^2 - J_y^2)\}_s]. \quad (23)$$

Этот вклад называют релятивистским, поскольку он пропадает при переходе от зоны Γ_8 к зоне Γ_{15} . В то же время кубический по волновому вклад, отличающийся от (22) заменой $\sigma_i \rightarrow J_i$, сохраняется и в зоне Γ_{15} . Все допустимые симметрией кубические по $\mathbf{k}$ слагаемые в валентной зоне можно записать в виде

$$\mathcal{H}_{so} = \gamma_v(\mathbf{J} \cdot \boldsymbol{\kappa}) + \frac{\delta\gamma_v}{2} \left[a_2 \sum_i J_i^3 \kappa_i + a_3 \sum_i \{J_i(J_{i+1}^2 - J_{i+2}^2)\} \kappa_i (k_i^2 - k^2/3) \right], \quad (24)$$

где $\kappa_x = k_x(k_y^2 - k_z^2)$, γ_v , $\delta\gamma_v$, a_2 , a_3 – константы.

- Структуры, симметрия которых оставляет инвариантным вектор $\mathbf{n}$ (вюрцитные CdS, GaN). В этом случае в гамильтониане допустимы линейные по $\mathbf{k}$ члены

$$\mathcal{H}_{so} = \beta[\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{k}] \cdot \mathbf{n}. \quad (25)$$

Вклад такого типа был предложен Э.И. Рашбой (1959) [Э. И. Рашба, В.И. Шека, *Симметрия энергетических зон в кристаллах типа вюрцита. II Симметрия зон учетом спин-орбитального взаимодействия*, ФТТ (сборник статей II), 162 (1959), 9; Э. И. Рашба, *Свойства полупроводников с петлей экстремумов. I. Циклотронный и комбинационный резонанс в магнитном поле, перпендикулярном плоскости петли*, ФТТ **2**, 1224 (1960), 10].

В. Микроскопические механизмы

Спин-орбитальная связь в зоне проводимости возникает за счет $\mathbf{k}\mathbf{p}$ -смешивания с другими зонами, главным образом – с валентной. В рамках восьмизонной модели Кейна, где учитываются лишь зона проводимости Γ_6 и валентные зоны Γ_8 , Γ_7 , не учитывается нецентросимметричность материала. Вклад Дрессельхауза в эффективный гамильтониан можно получить в рамках расширенной модели Кейна, в которой учитывается возбужденная зона проводимости. Такие зоны имеют симметрию как у вершины валентной зоны Γ_8 , Γ_7 , см. рис. 1, орбитальные функции удобно обозначать как $\mathcal{X}'$, $\mathcal{Y}'$ и $\mathcal{Z}'$. В рамках расширенной модели Кейна учитываются следующие матричные элементы оператора импульса

$$P = i\frac{\hbar}{m_0}\langle S|p_z|\mathcal{Z}\rangle, \quad P' = i\frac{\hbar}{m_0}\langle S|p_z|\mathcal{Z}'\rangle, \quad Q = i\frac{\hbar}{m_0}\langle \mathcal{X}|p_y|\mathcal{Z}'\rangle. \quad (26)$$

Именно матричный элемент P' отвечает за снятие центра инверсии. Помимо этого, ненулевым оказывается матричный элемент Δ^- спин-орбитального взаимодействия между валентной зоной и высокой зоной проводимости.

Оценку константы Дрессельхауза можно получить из соображений размерности. Для волновых векторов $k \sim 1/a$ (a – постоянная решетки) слагаемое Дрессельхауза должно по порядку величины соответствовать “атомной” энергии (E_g или Δ). Поэтому $\gamma \sim \text{eV} \cdot \text{\AA}^3$ (в GaAs $\gamma \sim 20 \text{ eV} \cdot \text{\AA}^3$). Подробная теория эффекта Дрессельхауза в объемных полупроводниках развита в обзоре Г. Е. Пикус, В. А. Марушак, А. Н. Титков, *Спиновое расщепление зон и спиновая релаксация носителей в кубических кристаллах A_3B_5* , ФТТ **22**, 185 (1988) [11].

В рамках модели Кейна, учитывающей лишь зону проводимости Γ_6 и валентную зону Γ_8 можно получить вклад Рашбы, рассмотрев, например, объемный полупроводник во внешнем электрическом поле $\mathbf{E}$. Наличие поля также снимает центр пространственной инверсии и допускает вклад Рашбы в эффективном гамильтониане (25), причем $\mathbf{n} = \mathbf{E}/|\mathbf{E}|$.

В рамках $\mathbf{k}\cdot\mathbf{p}$ метода теории возмущений волновую функцию электрона в зоне проводимости можно записать в виде

$$\Psi_{\mathbf{k},s} = e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}[\mathcal{S} + i\mathbf{R}(A\mathbf{k} - iB[\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{k}])]\chi_s. \quad (27)$$

Эта формула верна в низшем порядке по $\mathbf{k}$, здесь $\mathcal{S} \equiv \mathcal{S}(\mathbf{r})$ – блоховская амплитуда дна зоны проводимости, $\mathbf{R} = (\mathcal{X}, \mathcal{Y}, \mathcal{Z})$ – вектор, составленный из блоховских амплитуд вершины валентной зоны,

$$A = P \frac{3E_g + 2\Delta}{3E_g(E_g + \Delta)}, \quad B = -P \frac{\Delta}{3E_g(E_g + \Delta)}. \quad (28)$$

Внешнее поле учитывается по теории возмущений, оператор возмущения

$$\mathcal{V} = -e\mathbf{E}\mathbf{r} = -eE_z z,$$

(пусть $\mathbf{E} \parallel z$). Воспользуемся следующим приемом: в плоскости (xy) движение электрона свободное, а волновая функция движения вдоль оси z записывается в виде $\varphi(z)$.² Введем оператор $\hat{\mathbf{k}} = (k_x, k_y, -i\partial/\partial z)$. Тогда уравнение (27) можно переписать как

$$\Psi_{\mathbf{k},s} = e^{i\mathbf{k}\boldsymbol{\rho}}[\mathcal{S} + i\mathbf{R}(A\hat{\mathbf{k}} - iB[\boldsymbol{\sigma} \times \hat{\mathbf{k}}])]\varphi(z)|\chi_s\rangle, \quad \mathbf{k} = (k_x, k_y), \quad \boldsymbol{\rho} = (x, y). \quad (29)$$

Вклад в эффективный гамильтониан электрона, индуцированный внешним полем, можно записать в виде матрицы 2×2 по спиновым индексам s, s' :

$$\mathcal{H}_{\text{eff},ss'} = \langle \Psi_{\mathbf{k},s} | -eE_z z | \Psi_{\mathbf{k},s'} \rangle.$$

В матричном виде (мы сохранили в последнем равенстве только спин-зависимую часть)

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{eff}} &= -eE_z \times \\ &\int dz \left\{ \left[\mathcal{S} + i\mathbf{R}(A\hat{\mathbf{k}} - iB[\boldsymbol{\sigma} \times \hat{\mathbf{k}}]) \right] \varphi(z) \right\}^\dagger z \left\{ \left[\mathcal{S} + i\mathbf{R}(A\hat{\mathbf{k}} - iB[\boldsymbol{\sigma} \times \hat{\mathbf{k}}]) \right] \varphi(z) \right\} \\ &= -2eE_z(2AB + B^2)[\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{k}]_z \int dz z \varphi(z) i\hat{k}_z \varphi(z). \end{aligned} \quad (30)$$

Последний переход удобно проверить, воспользовавшись следующими соотношениями:

$$-ik_i \varphi(z) B[\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{k}]_i \varphi(z) \rightarrow -i[k_z \varphi(z)]^\dagger [\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{k}]_z - i[[\mathbf{k} \varphi(z)]^\dagger \times \boldsymbol{\sigma}]_z k_z \varphi(z) \quad (31)$$

$$AB[\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{k}]_z \varphi'(z) \varphi(z) - AB[\mathbf{k} \times \boldsymbol{\sigma}]_z \varphi'(z) \varphi(z) = 2AB[\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{k}]_z \varphi'(z) \varphi(z),$$

и

$$[\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{a}][\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{b}] = i\boldsymbol{\sigma}[\mathbf{a} \times \mathbf{b}].$$

² Такое приближение соответствует тому, что к системе наряду с внешним полем приложен плавный потенциал, обеспечивающий локализацию электрона.

Заметим, что

$$\int dz z \varphi(z) i \hat{k}_z \varphi(z) = \int dz z \varphi(z) \varphi'(z) = \frac{1}{2} \int dz z [\varphi^2(z)]' = -\frac{1}{2} \int dz \varphi^2(z) = -\frac{1}{2}.$$

Поэтому гамильтониан Рашбы принимает вид

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = \xi e [\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{k}] \mathbf{E}, \quad (32)$$

где

$$\xi = 2AB + B^2 = -\frac{P^2}{3} \frac{\Delta(2E_g + \Delta)}{E_g^2(E_g + \Delta)^2}. \quad (33)$$

Оценки: $\xi \approx 5 \text{ \AA}^2$ в GaAs, $500 \text{ \AA}^2$ в InSb.

С. Спиновые расщепления в структурах с квантовыми ямами и квантовыми проволоками

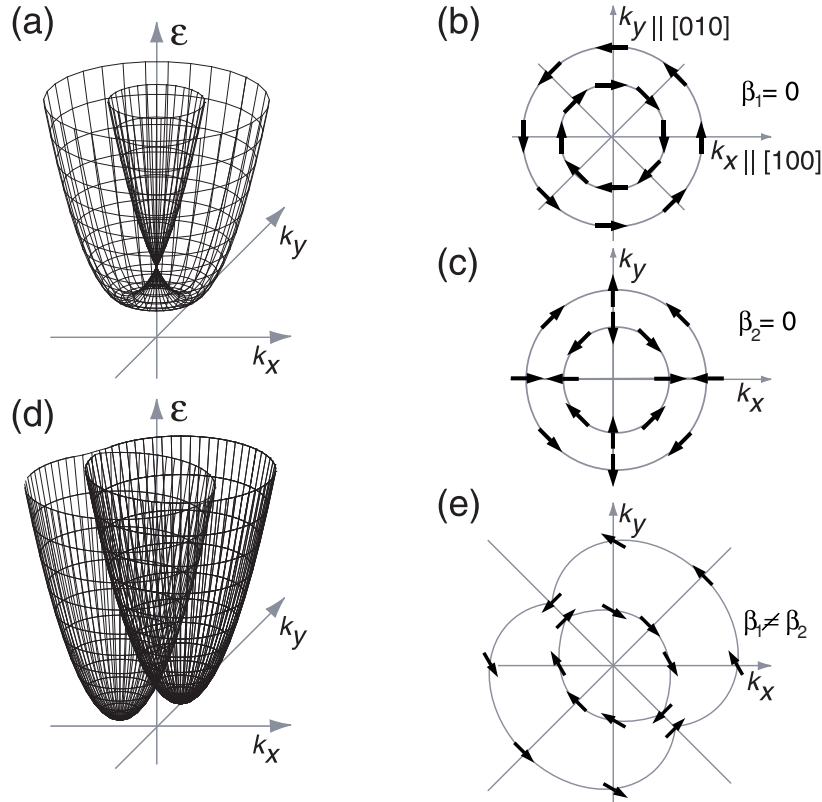


Рис. 3. Схематическая иллюстрация энергетического спектра в квантовой яме с решеткой цинковой обманки, выращенной вдоль оси $z \parallel [001]$. (a) спектр в случае только одного вклада в спиновое расщепление $\beta_1 \cdot \beta_2 = 0$, (b) ориентация спина в собственных состояниях в случае спинового расщепления Рашбы (c) в случае расщепления Дрессельхауза, (d) спектр в случае равных вкладов в спиновое расщепление $\beta_1 = \beta_2$, (e) ориентация спина при ненулевых β_1, β_2 . Воспроизведено из [12].

Проанализируем причины снятия спинового вырождения в квантовых ямах.

- Квантовые ямы, сделанные из нецентросимметричного материала – объемная инверсионная асимметрия, bulk inversion asymmetry (BIA). Пример: квантовая яма, выращенная из GaAs вдоль оси z || [001]. Пусть $\varphi(z)$ – огибающая волновой функции вдоль оси z . Усредним уравнение (22) по движению электрона вдоль оси z :

$$\mathcal{H}_D = \beta_1(\sigma_y k_y - \sigma_x k_x), \quad (34)$$

где $\beta_1 = \gamma \langle k_z^2 \rangle$, а $\langle k_z^2 \rangle = \int dz \varphi(z) \hat{k}_z^2 \varphi(z)$ – квантовомеханическое среднее z компоненты волнового вектора.

- Квантовые ямы с асимметричным гетеропотенциалом, имеется вклад Рашбы:

$$\mathcal{H}_R = \beta_2(\sigma_x k_y - \sigma_y k_x). \quad (35)$$

Такая система обладает структурной инверсионной асимметрией (structure inversion asymmetry, SIA). Отметим, что основной вклад в β_2 вносят разрывы зонных параметров (P , Δ) на интерфейсах ямы.

- Интерфейсная инверсионная асимметрия (interface inversion asymmetry, ИА). Зависимость интерфейсного вклада от оператора спина и волнового вектора такая же, как и у гамильтониана Дрессельхауза (34).

Отметим, что вклады SIA и ИА возможны и в квантовых ямах на основе центросимметричных полупроводников. Слагаемое SIA не зависит от выбора кристаллографических осей, а вклады BIA и ИА меняют свой вид в различных системах координат. Энергетический спектр и ориентация спина в собственных состояниях приведены на рисунке 3. С деталями теории спиновых расщеплений в квантовых ямах можно ознакомиться в книге R. Winkler, *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*, Springer-Verlag Berlin (2003) [13]. Спиновые расщепления в валентной зоне объемных полупроводников анализировались в обзоре [11], а в квантовых ямах вклады объемной инверсионной асимметрии в M. V. Durnev, M. M. Glazov, and E. L. Ivchenko, *Spin-orbit splitting of valence subbands in semiconductor nanostructures*, Phys. Rev. B **89**, 075430 (2014) [14].

Оценка вклада Дрессельхауза: квантовая яма шириной $100 \text{ \AA}$, $k_{\parallel} = 10^6 \text{ cm}^{-1}$.

$$\gamma \langle k_z^2 \rangle \approx \gamma \frac{\pi^2}{a^2} \approx 20 \text{ eV \AA}^3 \frac{\pi^2}{(100 \text{ \AA})^2} = 2 \times 10^{-2} \text{ eV \AA}.$$

$$\gamma \langle k_z^2 \rangle k_{\parallel} \approx 2 \times 10^{-2} \text{ eV \AA} \times 10^{-2} \text{ \AA}^{-1} = 0.2 \text{ meV}.$$

В структурах с квантовыми проволоками ситуация еще проще: линейные по $\mathbf{k}$ члены в эффективном гамильтониане, если допустимы по симметрии, имеют следующий вид

$$\mathcal{H}_1 = \beta \sigma_{\lambda} k_z, \quad (36)$$

где z – ось роста проволоки, β – константа, а σ_λ комбинация матриц Паули, соответствующая какой-то фиксированной оси в пространстве λ . Соответственно, вектор эффективного магнитного поля направлен вдоль этой же оси: $\mathbf{\Omega}_k = (2\beta/\hbar)\mathbf{e}_\lambda$, где $\mathbf{e}_\lambda$ – единичный вектор вдоль оси λ .

-
- [1] Оптическая ориентация / Под ред. Б. П. Захарченя, Ф. Майер. — Наука, Л., 1989.
 - [2] Spin physics in semiconductors / Ed. by M. I. Dyakonov. Springer Series in Solid-State Sciences 157. — 2nd ed. edition. — Springer International Publishing, 2017.
 - [3] Glazov M. Electron & Nuclear Spin Dynamics in Semiconductor Nanostructures. Series on Semiconductor Science and Technology. — OUP Oxford, 2018.
 - [4] Бур Г., Пукис Г. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. — М. Наука, 1972.
 - [5] Roth L. M., Lax B., Zwerdling S. Theory of optical magneto-absorption effects in semiconductors // *Phys. Rev.* — 1959. — Vol. 114, no. 1. — P. 90.
 - [6] Ивченко Е. Л., Киселев А. А. Электронный g -фактор в квантовых ямах и сверхрешетках // *ФТП*. — 1992. — Т. 26. — С. 1471.
 - [7] Universal behavior of the electron g factor in GaAs/Al_xGa_{1-x}As quantum wells / I. A. Yugova, A. Greulich, D. R. Yakovlev et al. // *Phys. Rev. B*. — 2007. — Vol. 75, no. 24. — P. 245302.
 - [8] Dresselhaus G. Spin-orbit coupling effects in zinc blende structures // *Phys. Rev.* — 1955. — Vol. 100. — P. 580.
 - [9] Раиба Э. И., Шека В. И. Симметрия энергетических зон в кристаллах типа вюрцита. ii Симметрия зон учетом спин-орбитального взаимодействия // *ФТТ (сборник статей II)*. — 1959. — P. 162.
 - [10] Раиба Э. И. Свойства полупроводников с петлей экстремумов. I. Циклотронный и комбинационный резонанс в магнитном поле, перпендикулярном плоскости петли // *ФТТ*. — 1960. — Т. 2, № 6. — С. 1224.
 - [11] Пукис Г. Е., Марущак В. А., Тимков А. Н. Спиновое расщепление зон и спиновая релаксация носителей в кубических кристаллах A₃B₅ // *ФТТ*. — 1988. — Т. 22. — С. 185.
 - [12] Ivchenko E. L. Optical spectroscopy of semiconductor nanostructures. — Alpha Science, Harrow UK, 2005.
 - [13] Winkler R. Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems. — Springer, 2003.
 - [14] Durnev M. V., Glazov M. M., Ivchenko E. L. Spin-orbit splitting of valence subbands in semiconductor nanostructures // *Phys. Rev. B*. — 2014. — Vol. 89. — P. 075430.