

ЭЛЕКТРОННЫЙ g -ФАКТОР В КВАНТОВЫХ ПРОВОЛОКАХ И КВАНТОВЫХ ТОЧКАХ

Е.Л.Ивченко, А.А.Киселев

Физико-технический институт им. А.Ф.Иоффе РАН
194021 Санкт-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 17 ноября 1997 г.

После переработки 1 декабря 1997 г.

Развита теория эффекта Зеемана для электронов в одно- и нуль-мерных полупроводниковых гетероструктурах. Установлена связь между числом линейно независимых компонент тензора g -факторов и точечной симметрией низкоразмерной системы. Конкретный расчет выполнен для сферической квантовой точки и цилиндрической проволоки.

PACS: 71.18.+y, 71.20.-b, 73.20.Dx

В полупроводниках с решеткой цинковой обманки значения эффективного электронного фактора Ландэ, или g -фактора, изменяются в зависимости от химического состава в широких пределах ($g \approx 2$ в широкозонных материалах, $g = -0.44$ в GaAs и $g \approx -50$ в InSb). Эта зависимость хорошо описывается формулой Рот (Roth) [1], выведенной во втором порядке kp -теории возмущений. В [2] мы обобщили теорию g -фактора на структуры с квантовыми ямами и сверхрешетки, рассчитали его зависимость от ширины слоев и предсказали аномально большую анизотропию эффекта Зеемана для электронов в зоне проводимости гетероструктуры. Эксперимент подтвердил применимость развитой теории для структур, выращенных на основе кубических полупроводников A_3B_5 и A_2B_6 [3–9]. Появились первые измерения g -фактора в структурах с квантовыми точками [10]. В настоящей работе построена теория эффекта Зеемана для электронов в квазиодномерных и квазинульмерных системах, то есть в квантовых проволоках и точках. Зависимость g -фактора от размера системы рассчитана для проволоки с круглым сечением и для сферической квантовой точки.

Как и в [2], для расчета электронного g -фактора мы используем модель Кейна, в которой точно учитывается kp -смешивание состояний в зоне проводимости Γ_8 и в валентных зонах Γ_8 , Γ_7 , но пренебрегается влиянием далеких зон. Разложим волновую функцию электрона по блоховским функциям $c_s R_j(r)$, где c_s ($s = \pm 1/2$) – спиновые столбцы \uparrow и \downarrow , R_j – координатные функции S (представление Γ_1 точечной группы T_d) и X, Y, Z (представление Γ_{15}). Восемь огибающих удобно представить в виде спинора $u(r)$ с компонентами $u_{1/2}$, $u_{-1/2}$ при блоховских функциях $S\uparrow$, $S\downarrow$ и векторного спинора $v = (v_x, v_y, v_z)$, где v_x – спинор с компонентами $v_{x,1/2}$, $v_{x,-1/2}$ при блоховских функциях $X\uparrow$, $X\downarrow$ и т.д.

Уравнение Шредингера с kp гамильтонианом $H(\hat{k})$ в виде матрицы 8×8 удается свести к дифференциальному уравнению

$$\frac{\hbar^2 \hat{k}^2}{2m_c(E)} u = E u \quad (1)$$

для спинора u , а векторный спинор v связать с градиентом ∇u соотношением

$$v = \frac{1}{P} \frac{\hbar^2}{2m_c(E)} \nabla u - i \frac{1}{P} \frac{\hbar^2}{4m_0} [g(E) - g_0](\vec{\sigma} \times \vec{\nabla}) u. \quad (2)$$

Здесь E – энергия электрона, отсчитанная от дна зоны проводимости Γ_6 , $\hat{k} = -i \nabla$, $P = i(\hbar/m_0)\langle S|\hat{p}_z|Z\rangle$, m_0 и g_0 – масса и фактор Ланде свободного электрона ($g_0 \approx 2$),

$$\frac{1}{m_c(E)} = \frac{2P^2}{3\hbar^2} \left(\frac{2}{E_g + E} + \frac{1}{E_g + E + \Delta} \right), \quad (3)$$

$$g(E) = g_0 - \frac{4m_0P^2}{3\hbar^2} \frac{\Delta}{(E_g + E)(E_g + E + \Delta)}.$$

Граничными условиями являются требование непрерывности спинора $u(r)$ и составляющей вектора $Pv(r)$ в направлении нормали к гетерогранице.

Заметим, что $m_c^{-1}(0)$ и разность $g(0) - g_0$ представляют собой вклад валентной зоны в обратную эффективную массу и g -фактор электрона на дне зоны проводимости, рассчитываемый во втором порядке kp -теории возмущений. Если волновая функция локализована в одном из направлений ζ вследствие размерного квантования, то для нахождения g -фактора в магнитном поле $B \perp \zeta$ можно использовать первый порядок теории возмущений по добавке к электронному гамильтониану, линейной по магнитному полю. Ранее этот прием был использован при расчете поперечного g -фактора в квантовых ямах [11]. В структуре с квантовой точкой, в которой волновая функция локализована во всех трех направлениях, первый порядок теории возмущений применим и тензор g -факторов $g_{\alpha\beta}$ для основного уровня размерного квантования $e1$ определяется выражением

$$\frac{1}{2} \mu_B \sigma_{\alpha,ss'} g_{\alpha\beta} B_\beta = \frac{1}{2} g_0 \mu_B \sigma_{\alpha,ss'} B_\alpha + \langle e1, s | \delta H | e1, s' \rangle. \quad (4)$$

Здесь μ_B – магнетон Бора, σ_α ($\alpha = x, y, z$) – матрицы Паули, проекция электронного спина $s, s' = \pm 1/2$, δH – возмущение, линейное по векторному потенциалу $A(r)$: $\delta H = (e/c)\hat{V}A$, $-e$ – заряд электрона, в модели Кейна оператор скорости $\hat{V} = \hbar^{-1}\partial H(k)/\partial k$ представляет собой матрицу 8×8 с компонентами, не зависящими от k . Формула (4) применима и для состояния электрона на дне подзоны $e1$ в квантовой проволоке, если: а) выбрать калибровку векторного потенциала такой, чтобы он зависел от координат в плоскости, перпендикулярной главной оси проволоки z , и б) вычесть диамагнитное слагаемое [11]

$$\frac{e}{c} \langle e1, s | \hat{v}_z | e1, s' \rangle \langle A_z(\mathbf{r}) \rangle,$$

которое может быть отлично от нуля при низкой симметрии сечения проволоки. Заметим, что среднее $\langle A_z \rangle \equiv \langle e1, s | A_z | e1, s \rangle$ не зависит от спина s . Используя явный вид матрицы \hat{V} , приходим к основной формуле для расчета g -фактора

$$\langle e1, s | \delta H | e1, s' \rangle = i \frac{e}{c\hbar} \int P [(\mathbf{A} \mathbf{v}_s^+) u_{s'} - u_s^+ (\mathbf{A} \mathbf{v}_{s'})] dr. \quad (5)$$

В общем случае спинорную функцию $u(r)$ можно представить в виде

$$u(r) = [f(r) + i \sigma_\alpha h_\alpha(r)] c_s, \quad c_s = \uparrow \text{ или } \downarrow,$$

где $f(r)$, $h_\alpha(r)$ – вещественные функции. Симметрия квантовой точки или проволоки налагает ограничения на вид этих функций. В частности, в квантовой

точке симметрии D_{2d} (симметрия прямоугольного параллелепипеда или эллипсоида) для основного электронного уровня e_1 имеем: $f(\mathbf{r}) = f(x^2, y^2, z^2)$, $h_x(\mathbf{r}) = yz M_x(x^2, y^2, z^2)$, $h_y(\mathbf{r}) = zx M_y(x^2, y^2, z^2)$, $h_z(\mathbf{r}) = xy M_z(x^2, y^2, z^2)$, где M_α – произвольные функции x^2, y^2, z^2 . Огибающая волновой функции электрона в состоянии с $k_z = 0$ в квантовой проволоке не зависит от z . Поэтому в квантовой проволоке с прямоугольным сечением $h_x(\mathbf{r}) \equiv h_y(\mathbf{r}) \equiv 0$, $h_z(\mathbf{r}) = xy M_z(x^2, y^2, z^2)$. В цилиндрической проволоке $f(r) = f(\rho = \sqrt{x^2 + y^2})$, а три функции $h_\alpha(r)$ тождественно равны нулю, так как из степеней координат x, y нельзя составить комбинаций, преобразующихся в группе $D_{\infty h}$ как компоненты псевдовектора. По аналогичной причине в сферической квантовой точке также $h_\alpha(r) = 0$.

Подставляя в (5) выражение для $u_s(r)$ в виде $f(r)c_s$, получаем, что электронный g -фактор изотропен не только в сферической квантовой точке, но и в цилиндрической проволоке. Этот неожиданный результат можно понять без подробных вычислений. Действительно, выберем для $\mathbf{B} \perp z$ калибровку $\mathbf{A} = (0, 0, -xB_y)$, а для $\mathbf{B} \parallel z$ – калибровку $\mathbf{A} = (0, xB_z, 0)$. Так как в цилиндрической проволоке функции h_α тождественно равны нулю, функция f для основного состояния не зависит от азимутального угла и оператор скорости в модели Кейна – матрица с постоянными коэффициентами, то обе компоненты g -фактора пропорциональны одному и тому же интегралу $\int dx dy f(\rho) x (\partial/\partial x) f(\rho)$, а коэффициенты пропорциональности не зависят от размеров проволоки. Так как при $R \rightarrow \infty$ g -фактор изотропен (как в объемном полупроводнике), то, значит, он изотропен и при любом R .

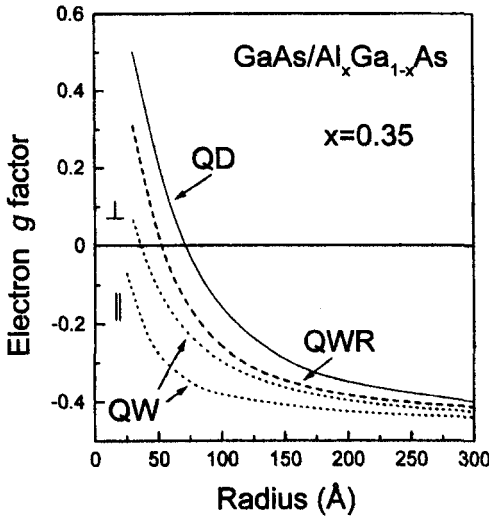
После подстановки функции f в (5) и интегрирования по частям, получаем для круглой проволоки и сферической точки

$$g = \eta g_0 + [g_B(E) - g_A(E)] V_{3-d}(R) f^2(R) + [g_A(E) - g_0] w_A + [g_B(E) - g_0] w_B, \quad (6)$$

где V_n – объем сферы в пространстве размерности n : $V_2 = \pi R^2$, $V_3 = 4\pi R^3/3$, $g_A(E)$ и $g_B(E)$ определены в соответствии (3), w_A, w_B – интегралы от функции f^2 по области, занимаемой материалом А или В (при $v \neq 0$ сумма $w_A + w_B$ отлична от единицы). Коэффициент $\eta \neq 1$ в силу смешивания при $E > 0$ состояний спина \uparrow и \downarrow , он может быть анизотропен в системах низкой симметрии; однако оценки показывают, что его отличием от единицы, как правило, можно пренебречь. С ростом радиуса R значение w_A стремится к единице, а энергия E уровня e_1 , произведение $V_{3-d}(R)f^2(R)$ и величина w_B убывают до нуля, так что при $R \rightarrow \infty$ g фактор стремится по закону $g(R) = g_A(0) + (R_d/R)^2$ к объемному значению в материале А, при этом $R_1 < R_0$.

В данной работе мы рассчитали g -фактор в сферической квантовой точке и цилиндрической проволоке, в которых огибающая $f(r)$ для уровня e_1 имеет соответственно вид $Cr^{-1} \sin kr$ при $r < R$, $Dr^{-1} \exp[-\kappa(r - R)]$ при $r > R$ и $CJ_0(k\rho)$ при $\rho < R$, $DK_0(\neq \rho)$ при $\rho > R$. Здесь R – радиус, $k = [2m_A(E)E/\hbar^2]^{1/2}$, $\neq [2m_B(E)(\Delta E_c - E)/\hbar^2]^{1/2}$, $J_0(x)$ и $K_0(x)$ – функции Бесселя, ΔE_c – разрыв зоны проводимости на гетерогранице двух материалов, обозначаемых далее в виде А и В, $m_A(E)$ – определенная согласно (3) масса $m_c(E)$ для материала А, аналогичная масса $m_B(E)$ определена для параметров материала В с учетом разрыва зон, то есть $m_B(E) = m_c(E - \Delta E_c)$, коэффициенты C и D находятся из граничных условий: непрерывность f и нормальной составляющей вектора $m_c^{-1}(E)\nabla f$, и из нормировки $\int (u^+ u + v^+ v) dV_{3-d} = 1$, где $d = 0$ или 1 , dV_n – элементарный объем в пространстве размерности n .

Формула (6) применима и для расчета поперечного g -фактора $g_{\perp} = g_{xx} = g_{yy}$ для электрона в квантовой яме ширины $2R$, для которой $d = 2$, $V_{3-d} = 2R$ и в которой $f = C \cos kz$ при $|z| < R$, $D \exp[-\alpha(|z| - R)]$ при $|z| > R$.



Зависимость электронного g -фактора от линейных размеров структуры в гетеросистеме GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As. Значения для сферической квантовой точки и цилиндрической квантовой проволоки радиуса R представлены соответственно сплошной и штриховой линиями. Для сравнения также показаны продольная и поперечная компоненты тензора электронного g -фактора ($g_{\parallel}^{QW} < g_{\perp}^{QW}$) для одиночной квантовой ямы толщиной $2R$ (пунктир)

На рисунке представлен электронный g -фактор в сферической квантовой точке (g^{QD}) и цилиндрической проволоке (g^{QWR}) как функция радиуса R . Для сравнения на этом же графике пунктирными линиями показаны значения продольного (g_{\parallel}^{QW} , $B \parallel z$) и поперечного (g_{\perp}^{QW} , $B \perp z$) g -фактора для квантовой ямы шириной $2R$. Модельный расчет выполнен для гетеросистемы GaAs/Al_{0.35}Ga_{0.65}As. При расчете использованы следующие значения параметров: $E_g = 1.52$ эВ, $\Delta = 0.34$ эВ, $2p_{cv}^2/m_0 = 28.9$ эВ для объемного GaAs ($p_{cv} = i(S|\hat{p}_z|Z)$), и $E_g = 1.94$ эВ, $\Delta = 0.32$ эВ, $2p_{cv}^2/m_0 = 26.7$ эВ для материала барьера, скачки зон на гетероинтерфейсе $\Delta E_v : \Delta E_c = 2:3$. Для того, чтобы учесть вклад далеких зон, мы добавили константу $\Delta g = -0.12$ к значениям g -фактора, полученным в рамках модели Кейна. При этом с увеличением размера структуры электронный g -фактор достигает объемного значения -0.44 в GaAs. С уменьшением линейных размеров структуры g -фактор возрастает, стремясь при $R \rightarrow 0$ к значению 0.57 в материале барьера. Поскольку с понижением размерности системы роль эффектов размерного квантования возрастает, выполняются соотношения $g_{\parallel, \perp}^{QW} < g^{QWR} < g^{QD}$ (см. рисунок). Оценки показывают, что вклад слагаемого в формуле (6), пропорционального $f^2(R)$, не мал, что исключает аппроксимацию зависимости $g(R)$ в виде $g_A(E)w_A + g_B(E)w_B$.

Таким образом, используя модель Кейна, мы построили теорию электронного g -фактора в полупроводниковых квантовых точках и квантовых проволоках, провели симметричный анализ для ряда конкретных микроструктур, показали, что в отличие от квантовой ямы, в которой $g_{\parallel} \neq g_{\perp}$, g -фактор в цилиндрической проволоке (системе той же точечной симметрии) изотропен, и выполнили модельный расчет для сферической точки и цилиндрической проволоки.

Авторы выражают благодарность Российскому фонду фундаментальных исследований и Фонду Фольксвагена (Volkswagen Foundation) за финансовую поддержку.

-
1. L.M.Roth, V.Lax, and S.Zwerdling, *Phys. Rev.* **114**, 90 (1959).
 2. Е.Л.Ивченко, А.А.Киселев, *ФТТ* **26**, 1471 (1992).
 3. E.L.Ivchenko, V.P.Kochereshko, I.N.Uraltsev, and D.R.Yakovlev, in: *High Magnetic Fields in Semiconductor Physics*, Ed. G.Landwehr, Springer Series in Solid-State Sci. **101**, 533 (1992).
 4. В.К.Калевич, В.Л.Корнев, *Письма в ЖЭТФ* **56**, 257 (1992).
 5. В.Kowalski, P.Omling, В.К.Meyer et al., *Phys. Rev. B* **49**, 14786 (1994).
 6. R.M.Hannak, M.Oestreich, А.Р.Heberle et al., *Solid State Commun.* **93**, 313 (1995).
 7. A.A.Sirenko, T.Ruf, K.Eberl et al., in: *High Magnetic Fields in Semiconductor Physics*, Eds. G.Landwehr and W.Ossau, World Scientific, 1996, p. 561.
 8. P. Le Jeune, D.Robart, X.Marie et al., *Semicond. Sci. Technol.* **12**, 380 (1997).
 9. A.A.Sirenko, T.Ruf, and M.Cardona, *Phys. Rev. B* **56**, 2114 (1997).
 10. A.A.Sirenko, T.Ruf, A.Kurtenbach, and K.Eberl, *Proc. ICPS-23, Berlin 1996*, World Scientific, 1996, p. 1385.
 11. E.L.Ivchenko, A.A.Kiselev, and M.Willander, *Solid State Commun.* **102**, 375 (1997).