

# Глава 16

## Спин-орбитальное взаимодействие. Нарушение симметрии пространственной инверсии

### План

- Ковалентная связь и зонная структура в материалах IV группы и соединения  $A^{III}B^V$
- Качественное рассмотрение электронного спектра в присутствии СО взаимодействия
- Влияние СО взаимодействия на слабую локализацию. Роль линейных и кубических членов в энергетическом спектре
- Спектр электронов в квантующем поле в системе с СО-взаимодействием
- Радиус локализации в системе с беспорядком: роль различной симметрии

- Экспериментальное наблюдение эффектов СО взаимодействия: биения осцилляций ШдГ, комбинированный ЦР,

## 16.1 Ковалентная связь в практически важных материалах IV группы и соединения $A^{III}B^V$ <sup>1</sup>

Рассмотрим IV группу периодической таблицы Менделеева: C, Si, Ge и т.д.. Атомы углерода имеет электронную конфигурацию

$(1s)^2(2s)^2(2p)^2$ . Поскольку оболочка  $1s$  полностью заполнена, спины антипараллельны, то она инертна и не участвуют в химической связи. Казалось бы то же самое можно сказать и про оболочку  $(2s)^2$ , которая должна была бы быть химически нейтральной и атом углерода должен был бы быть двухвалентен. Однако, мы знаем, что атом углерода 4-валентен ( $CO_2$ ).

**Q: Почему атом углерода в химических соединениях проявляет валентность 4, а не 2?**

---

<sup>1</sup>Здесь описываются лишь сведения и простейшие приближения, в размере минимально необходимом для понимания дальнейшего изложения. Более подробное изложение данного материала можно найти в книгах: Н. Ашкрофт и Н. Мермин, “Физика твердого тела” (М. Мир); Ч. Киттель “Введение физику твердого тела” (М.Мир ), Ч. Киттель “Квантовая теория твердых тел” (М. Мир 1967); А. И. Ансельм “Введение в теорию полупроводников” (М. Фздатлит, 1978)

### 16.1. Ковалентная связь в практически важных материалах IV группы и соединения $A^{III}B^V$ 23

А: Химия дает следующий ответ, который, конечно, объясняет только сценарий, но не доказывает его:

В химических соединениях оболочка участвует не в основном, а в возбужденном состоянии  $(1s)^2(2s)^1(3p)^3$ . Т.о. спины не 2х, а 4х электронов не насыщены и участвуют в ковалентных связях. Из соображений минимума энергии эти связи совпадают с направлениями тетраэдра и поэтому конфигурация метана  $CH_4$  имеет имено тетраэдрическую конфигурацию. Тетраэдрические направления углеродных связей сохраняются и в ячейке алмаза.

Атом кремния имеет 4 электрона в наружной оболочке  $M$ :  $(3s)^2(3p)^2$ . Так как в оболочках  $K$  и  $L$  спины насыщены, то  $Si$  подобен атому углерода. Атом  $Ge$  также имеет 4 электрона в  $N$  оболочке  $(4s)^2(4p)^2$ . Атом олова также имеет 4 электрона в  $O$  оболочке  $(5s)^2(5p)^2$  и, наконец, атом свинца также имеет 4 электрона в  $P$  оболочке  $(6s)^2(6p)^2$ . Поэтому кремний, германий, серое олово кристаллизуются с помощью ковалентных связей в алмазоподобную решетку. В отличие от них, в обычном белом олове и свинце, за счет большего объема поверхности Ферми, возникают свободные электроны и, в результате, металлическая связь преобладает над ковалентной.

Соединения типа  $A^{III}B^V$  имеют кристаллическую структуру и многие свойства подобные элементам IV группы  $Si$  и  $Ge$ . Важнейшими примерами являются  $GaAs$  и  $InSb$ . Индий имеет 3 электрона в  $O$  оболочке  $(5s)^2(5p)^1$ , а сурьма - 5 электронов  $(5s)^2(5p)^3$ . Если один электрон перейдет от сурьмы к индию, то образуется ковалентная связь, подобная связи в  $Ge$  или  $Si$ . Аналогичная ситуация имеет место и для  $GaAs$ . Чтобы образовалась ковалентная связь при сближении атомов у них должны быть электроны одного уровня со спинами направленными

противоположно друг другу (синглет), а сами атомы должны быть достаточно близко расположены друг от друга. Квантовомеханические ковалентные силы возникают вследствие перекрытия электронных оболочек и спадают экспоненциально с расстоянием; если расстояние большое, то начинают преобладать диполь-дипольное взаимодействие Ван-дер Ваальса.

## 16.2 Приближение сильной связи <sup>3</sup>

Приближение слабой связи работает, когда периодический потенциал  $V(r)$ , действующий на электроны со стороны решетки, мал и является слабым возмущением по сравнению с кинетической энергией электронов. Однако, для большинства металлов это соотношение не выполняется. Поэтому в чистом виде приближении слабой связи, как правило, не выполняется. В 60е годы метод слабой связи был дополнен строго развитым методом псевдопотенциала [1], т.е. потенциала решетки, сильно ослабленного за счет экранирования электронами проводимости и в таком виде он был успешно применен для количественных расчетов энергетических спектров металлов. Изложение этого метода выходит за рамки наших лекций.

В данной главе, для качественного рассмотрения уровней энергии электронов в кристалле мы используем противоположное качественное приближение - сильной связи. В нем предполагается, что состояние электрона мало изменится при образовании кристалла из атомного уровня. Итак, пусть волновая функция электрона  $\psi_0(r)$  в изолированном атоме в  $s$ -состоянии удовлетворяет уравнению Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_0(r) + \mathcal{U}(r)\psi_0(r) = \varepsilon_0\psi_0, \quad (16.1)$$

где  $\mathcal{U}(r)$  - сферически-симметричное поле изолированного нейтрального атома в полупроводнике. Пусть волновая функция

---

<sup>3</sup>Здесь описываются лишь сведения и простейшие приближения, в размере минимально необходимом для понимания дальнейшего изложения. Более подробное изложение данного материала можно найти в книгах: Н. Ашкрофт и Н. Мермин, “Физика твердого тела” (М. Мир); Дж. Займан “Принципы теории твердого тела” (М. Мир 1974); Ч. Киттель “Введение физику твердого тела” (М.Мир ), Ч. Киттель “Квантовая теория твердых тел” (М. Мир 1967); У. Харрисон “Теория твердого тела”(М. Мир, 1972), Ю. М. Гальперин, “Introduction to Modern Solid State Physics” (Oslo 2009)

нормирована

$$\int \psi_0 \psi_0^* d\tau = 1 \quad (16.2)$$

Вблизи  $n$ -узла решетки электрон в первом приближении можно рассмотреть как электрон в изолированном атоме, где он описывается волновой функцией  $\psi(|\mathbf{r} - \mathbf{a}_n|)$ . В идеальной решетке все  $N$  узлов одинаковы, поэтому состояние электрона с энергией  $\varepsilon_0$  является  $N$ -кратно вырожденным. Под влиянием взаимодействия электрона с другими атомами вырождение частично снимается (в зависимости от симметрии) и уровни энергии расщепятся в зону. Полную волновую функцию в нулевом приближении нужно сконструировать из линейной комбинации всех вырожденных функций:

$$\psi(r) = \sum_n C_n \psi_0(|\mathbf{r} - \mathbf{a}_n|) \quad (16.3)$$

Для определения коэффициентов  $C_n$  потребуем, чтобы (16.3) удовлетворяло общему виду функции Ванье. Для этого достаточно выбрать  $C_n = \exp(ika_n)$ . Тогда

$$\psi(r) = \sum_n e^{ika_n} \psi_0(|\mathbf{r} - \mathbf{a}_n|) \quad (16.4)$$

Ясно, что атомная волновая функция  $\psi_0(r)$  экспоненциально быстро спадает с расстоянием, поэтому вблизи  $n$ -ного узла полная волновая функция приближенно равна  $\psi(r) \approx A\psi_0(|\mathbf{r} - \mathbf{a}_n|)$ , т.е. атомной функции  $n$ -ного узла.

Если  $V(r)$  - самосогласованный периодический потенциал, действующий на электрон, то одноэлектронная волновая функция должна удовлетворять соотношению

$$\mathcal{H}\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi + V(r)\psi = \varepsilon\psi \quad (16.5)$$

Умножим обе части (16.5) слева на  $\psi^*$  и проинтегрируем по объему кристалла:

$$\varepsilon = \frac{\int \psi^* \mathcal{H} \psi d\tau}{\int \psi^* \psi d\tau} = \frac{\int \psi^* \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] \psi d\tau}{\int \psi^* \psi d\tau} \quad (16.6)$$

Вычислим энергию электрона подставив в уравнение (16.5) волновую функцию (16.4). Обозначим  $\rho_n = \mathbf{r} - \mathbf{a}_n$  и получаем:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}\psi = \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(r) \right] \sum_n e^{ika_n} \psi_0(\rho_n) = \\ \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_0 + V(r) \psi_0 \right] \sum_n e^{ika_n} \end{aligned} \quad (16.7)$$

Заменим теперь  $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_0(\rho_n)$ , воспользовавшись уравнением (16.1) для волновой функции изолированного атома:

$$\hat{\mathcal{H}}\psi = \varepsilon_0 \sum_n e^{ika_n} \psi_0(\rho_n) + \sum_n e^{ika_n} [V(r) - \mathcal{U}(\rho_n)] \psi_0(\rho_n) \quad (16.8)$$

Поскольку мы выразили многоэлектронную функцию через одноэлектронную, то подставим полученное выражение для  $\hat{\mathcal{H}}\psi$  в формулу (16.6). Получим

$$\begin{aligned} \varepsilon = \varepsilon_0 \frac{\int \psi^* \sum_n e^{ika_n} \psi_0(\rho_n) d\tau}{\int \psi^* \psi d\tau} + \text{Alligator} = \\ = \varepsilon_0 \frac{\int \psi^* \psi d\tau}{\int \psi^* \psi d\tau} = \varepsilon_0 + \text{Alligator} \end{aligned} \quad (16.9)$$

Теперь расправимся с крокодиллом:

$$Alligator = \frac{\sum_m \sum_n e^{ik(a_n - a_m)} \int \psi_0^*(\rho_m) [V(r) - \mathcal{U}(\rho_n)] \psi_0(\rho_n) d\tau}{\sum_m \sum_n e^{ik(a_n - a_m)} \int \psi_0^*(\rho_m) \psi_0(\rho_n) d\tau} \quad (16.10)$$

Вследствие эквивалентности всех узлов, числитель и знаменатель не могут зависеть от  $m$  и  $n$  в отдельности, а зависят только от их разности. Поэтому выберем  $m = 0$  и  $a_m = 0$ ,  $\rho_m = r$  и суммирование по  $m$  в числителе и знаменателе заменить просто умножением на число релевантных узлов  $N$ , которое к тому же и сокращается:

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + \frac{\sum_n e^{ika_n} \int \psi_0^*(r) [V(r) - \mathcal{U}(\rho_n)] \psi_0(\rho_n) d\tau}{\sum_n e^{ika_n} \int \psi_0^*(r) \psi_0(\rho_n) d\tau} \quad (16.11)$$

Будем считать, что атомные волновые функции спадают так быстро, что их перекрытием можно пренебречь, даже для соседних узлов. Тогда

$$\int \psi_0^*(r) \psi_0(\rho_n) d\tau = \delta_{0,n} = \begin{cases} 0, & n \neq 0, \\ 1, & n = 0 \end{cases}$$

Оценим интеграл в числителе (16.11) для  $n = 0$ .

$$\begin{aligned} \int \psi_0^*(r) [V(r) - \mathcal{U}(r)] \psi_0(\rho_n) d\tau = \\ \int |\psi_0^*(r)|^2 [V(r) - \mathcal{U}(r)] d\tau = -\mathcal{C} < 0 \end{aligned} \quad (16.12)$$

Рисунок 16.4 поясняет причину, по которой этот интеграл отрицателен. Действительно, перекрытие электронных волновых функций понижает потенциальные барьеры и облегчает туннелирование между соседними атомами. Поэтому квадратная скобка отрицательна и весь интеграл также отрицателен.



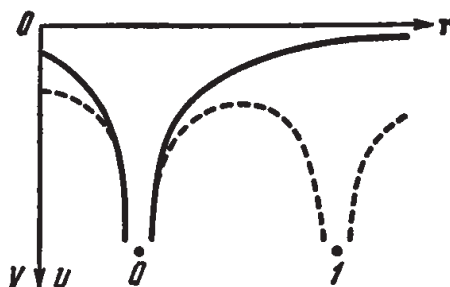


Рис. 16.1: Схематическое изображение потенциала. Сплошные линии показывают потенциал изолированного атома, штриховые линии — самосогласованный периодический потенциал

Хотя мы не учитываем последовательно перекрытие атомных волновых функций разных узлов, но кое-что можно приближенно оценить, учтя интеграл в числителе выражения (16.11) при  $n \neq 0$ , для соседних узлов  $n_0$ .

$$\int \psi_0^*(r) [V(r) - \mathcal{U}(\rho_{n_0})] \psi_0(\rho_{n_0}) d\tau = -A_{n_0} \quad (16.13)$$

Нетрудно понять из качественных соображений, что  $A > 0$  и т.о. интеграл отрицателен. Действительно, хотя  $\psi_0(\rho_{n_0})$  мало в области вблизи  $n$ , но эта малость компенсируется большой отрицательной разностью  $V(r) - \mathcal{U}(\rho_{n_0})$ . Обобщая эти соображения (16.12) и (16.13) запишем

$$\varepsilon = \varepsilon_0 - C - \sum_{n_0} A_{n_0} e^{ika_{n_0}} \quad (16.14)$$

Снова упростим рассмотрение, предположив что волновая функция имеет s-симметрию, и ограничим суммирование только ближайшими соседними атомами, находящимися от нулевого узла на одинаковом расстоянии. Тогда  $A_{n_0} = A$  постоянна

и

$$\varepsilon = \varepsilon_0 - C - A \sum_{n_0} e^{ika_{n_0}} \quad (16.15)$$

В простой кубической решетке каждый атом имеет 6 ближайших соседей. Выбрав оси координат по направлениям к ближайшим соседям (т.е. по ребрам куба) получим

$$\begin{aligned} \sum_{n_0=1}^6 e^{ika_{n_0}} &= e^{ik_x a} + e^{-ik_x a} + e^{ik_y a} + e^{-ik_y a} + e^{ik_z a} + e^{-ik_z a} = \\ &= 2 [\cos ak_x + \cos ak_y + \cos ak_z] \end{aligned}$$

Т.о. спектр электронов, сформированных из атомных  $s$ -орбиталей в простой кубической решетке

$$\varepsilon = \varepsilon_0 - C - 2A [\cos ak_x + \cos ak_y + \cos ak_z] \quad (16.16)$$

В объемно-центрированной кубической решетке координационное число 8 и вместо (16.16) получится

$$\varepsilon = \varepsilon_0 - C - 8A \cos \frac{ak_x}{2} \cos \frac{ak_y}{2} \cos \frac{ak_z}{2}$$

Из полученных выражений видно, что при образовании кристалла из изолированных атомов энергия атомных уровней уменьшается и уровни расплываются в зону, в которой энергия периодически зависит от волнового вектора  $k$ . Ширина разрешенной энергетической зоны пропорциональна величине  $A$ , т.е. перекрытию атомных волновых функций соседних атомов. Для внешних (валентных) волновых функций это перекрытие велико, порядка нескольких эВ, т.е. может превосходить даже расстояние между атомными уровнями изолированного атома. Для внутренних оболочек перекрытие мало и уширение в зону экспоненциально слабее. Например, для  $K$ -электронов в

металле уширение составляет  $10^{-19}$  эВ, т.е. зона остается резкой. Эта ситуация схематически изображена на рисунке (16.2)

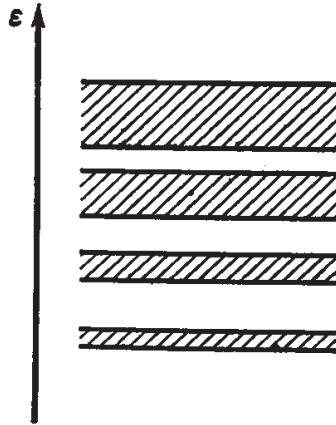


Рис. 16.2: Схематическое изображение энергетических зон в кристаллической решетке. Разрешенные энергетические зоны (полосы) заштрихованы

Ширина зоны  $\Delta\varepsilon$  связана соотношением неопределенности со временем  $\tau$  пребывания электрона вблизи данного узла, до тех пор пока он не протуннелирует на уровень соседнего узла решетки  $\Delta\varepsilon\tau \approx \hbar$ . Для внешних электронов  $\Delta\varepsilon \sim 10$  эВ и время пребывания на уровне  $10^{-15}$  с. Для внутренних электронов  $K$  зоны, как упоминалось выше, уширение составляет  $10^{-19}$  эВ и время пребывания электрона на данном внутреннем уровне  $\sim 3000$  с. Эти цифры не означают, конечно, что электрон прикреплен к данному узлу. Его волновая функция распределена равновероятно по всем узлам.

Пусть электроны находятся в кубической решетке и имеют спектр (16.16). Поймем как происходит движение электрона в зоне. Примем точку отсчета энергию  $\varepsilon_0 - C = 0$ . Из (16.16)

видно, что при изменении волнового вектора энергия имеет минимум в центре зоны и его значение составляет  $-6A$ . Максимальное значение энергии достигается при  $k_x = k_y = k_z = \pi/a$ , т.е. в вершинах куба и составляет  $+6A$ . Таким образом, в случае простой кубической решетки и волновых атомных функций  $p$ -типа ширина зоны составляет  $\Delta\varepsilon = 12A$ .

### 16.2.1 Динамика электрона в кубической решетке

Для малых импульсов  $k \ll \pi/a$  косинусы в формуле (16.6) можно разложить в ряд и получим

$$\varepsilon = -6A + Aa^2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = \varepsilon_0 + Aa^2 k^2 \quad (16.17)$$

Таким образом, спектр изотропен и квадратично зависит от  $k$ . Изотропная эффективная масса вблизи дна зоны

$$m^*(b) = \frac{\hbar^2}{\left(\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k_x^2}\right)_b} = \frac{\hbar^2}{2Aa^2} = \frac{6\hbar^2}{2a^2 \Delta\varepsilon} \quad (16.18)$$

положительна (т.е. соответствует электронному спектру) и обратно пропорциональна ширине зоны.

Точно также можно найти эффективную массу вблизи верхнего края зоны.

$$m^*(a) = \frac{\hbar^2}{\left(\frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k_x^2}\right)_a} = -\frac{\hbar^2}{2Aa^2} \quad (16.19)$$

Эффективная масса, как видно, отрицательна и равна по модулю массе электрона в центре зоны. Изоэнергетические поверхности в импульсном пространстве вблизи точек симметрии, в центре зоны и вблизи вершин, сферически симметричны.

ны. Вдали от этих точек экстремумов изоэнергетические поверхности имеют более сложную форму, показанную на рисунке.

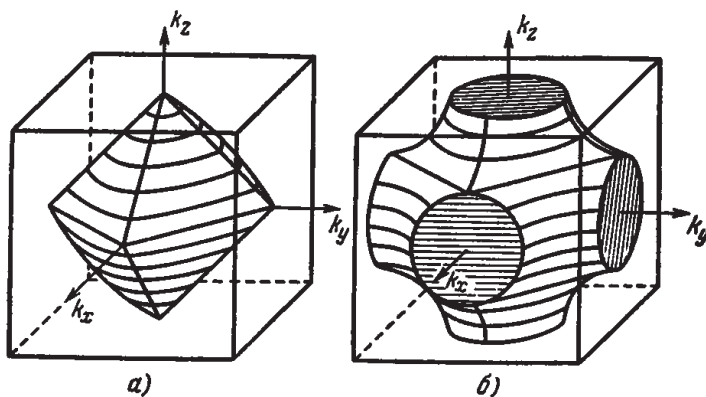


Рис. 16.3: Изоэнергетические поверхности в кубической кристаллической решетке. а) при значении энергии  $\varepsilon(k) = -2A$ , б)  $\varepsilon(k) = 0$

### 16.2.2 Уровни энергии в кубической решетке для атомных орбиталей $p$ -типа

Как следует из рассмотренного выше строения верхних атомных орбиталей в кристаллах элементов группы IV и соединений  $A^{III}B^V$  с орбитальной связью, наиболее вероятный случай это образование уровней энергии в кристалле из атомных  $p$ -орбиталей. Для простоты рассмотрим уровни энергии в простом кубическом кристалле в приближении сильной связи.

Следуя учебникам квантовой механики [22] волновую функцию электрона в произвольном сферическом поле  $\mathcal{U}(r)$  можно разложить по сферическим функциям:

$$\Psi_{nlm}(r, \theta, \phi) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \phi), \quad (16.20)$$

где  $R_{nl}$  - радиальная часть волновой функции, зависящая от главного квантового числа  $n$  и орбитального числа  $l \leq n-1$ , а  $Y_{lm}(\theta, \phi)$  - сферическая функция, зависящая от  $l$  и магнитного квантового числа  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \pm l$ . Энергия электронов зависит только от  $n$  и  $l$ , а в кулоновском поле - только от  $n$ . Поэтому  $n$ -состоянию  $p$ -электрона отвечают три волновые функции с  $m = 0, +1, -1$ :

$$\begin{aligned}\Psi_{n1,0} &= R_{n1}(r) \left(\frac{3}{4\pi}\right)^{1/2} \cos \theta, \\ \Psi_{n1,+1} &= R_{n1}(r) \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin \theta e^{i\phi}, \\ \Psi_{n1,-1} &= R_{n1}(r) \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin \theta e^{-i\phi}.\end{aligned}\quad (16.21)$$

Из этих волновых функций можно составить симметричные линейные комбинации, которые также будут решениями того же уравнения Шредингера. Опуская детали приведем их вид:

$$\begin{aligned}\frac{1}{2} [\Psi_{n1,1} + \Psi_{n1,-1}] &= R_{n1}(r) \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \cos \phi = x f(r) \equiv \Psi_x(\mathbf{r}), \\ \frac{1}{2} [\Psi_{n1,1} - \Psi_{n1,-1}] &= R_{n1}(r) \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \sin \theta \sin \phi = y f(r) \equiv \Psi_y(\mathbf{r}), \\ \frac{2}{\sqrt{2}} \Psi_{n1,0} &= R_{n1}(r) \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{1/2} \cos \theta = z f(r) \equiv \Psi_z(\mathbf{r})\end{aligned}\quad (16.22)$$

Здесь  $x = r \sin \theta \cos \phi$ ,  $y = r \sin \theta \sin \phi$ ,  $z = r \cos \theta$  - координаты электрона в прямоугольной системе, а  $f(r)$  - радиальная симметричная функция, зависящая от вида потенциала  $\mathcal{U}(r)$ . Для волновой функции в периодическом кристалле надо учесть трансляционный блоховский множитель, просуммиро-

вать по всем узлам решетки  $n$  и, наконец, учесть вырождение (16.16). В результате волновая функция будет состоять из трансляционного фактора, умноженного на линейную комбинацию трех функций  $(\alpha\Psi_x + \beta\Psi_y + \gamma\Psi_z)$ , и все это суммируется по всем узлам  $n$  решетки. Анализ показывает что только один из коэффициентов  $\alpha, \beta, \gamma$  может быть не равен нулю. Поэтому каждому значению волнового вектора  $k$  соответствуют три волновые функции, зависимости энергии которых от  $k$  совпадают для кубического кристалла, так что имеется трехкратное вырождение  $p$ -уровня. Вообще говоря, это уже было ясно и из (16.22), поскольку в кубическом кристалле энергия не может меняться от замены функции  $\Psi_x$  на  $\Psi_y$  или  $\Psi_z$ .

Из расчета следует, что соответствующие энергетические ветви имеют следующие зависимости:

$$\begin{aligned} \varepsilon_1 &= \varepsilon_0 - C + 2A \cos(ak_x) - 2B [\cos(ak_y) + \cos(ak_z)] & \alpha \neq 0, \beta = \gamma = 0, \\ \varepsilon_2 &= \varepsilon_0 - C + 2A \cos(ak_y) - 2B [\cos(ak_x) + \cos(ak_z)] & \beta \neq 0, \alpha = \gamma = 0, \\ \varepsilon_3 &= \varepsilon_0 - C + 2A \cos(ak_z) - 2B [\cos(ak_x) + \cos(ak_y)] & \gamma \neq 0, \alpha = \beta = 0, \end{aligned} \quad (16.23)$$

Здесь  $C$  - энергия  $p$ -электрона в изолированном атоме. Знаки постоянных  $A$  и  $B$  могут быть произвольными и для их нахождения в каждом конкретном случае нужны микроскопические или численные расчеты. Для качественного рассмотрения мы же возьмем случай  $A > 0, B < 0$ , который как будет видно ниже имеет отношение к рассматриваемым материалам. В этом случае минимуму энергии соответствуют точки  $\pm k_x = \pm k_y = \pm k_z = \pi/a$ , т.е. вершины куба зоны Бриллюэна. Это не очень актуально, и является следствием приближения кубической симметрии. Более актуальны максимумы энергии, которые достигаются для всех ветвей в центре зоны Бриллюэна.

эна, т.е. в точке  $\Gamma$ .

Разлагая энергии трех ветвей спектра вблизи общего максимума получаем:

$$\begin{aligned}\varepsilon_1 &= (2A + 4B) - Aa^2k_x^2 - Ba^2(k_y^2 + k_z^2) \\ \varepsilon_2 &= (2A + 4B) - Aa^2k_y^2 - Ba^2(k_x^2 + k_z^2) \\ \varepsilon_3 &= (2A + 4B) - Aa^2k_z^2 - Ba^2(k_x^2 + k_y^2).\end{aligned}\quad (16.24)$$

Энергетические поверхности имеют вид одинаковых эллипсоидов с осями, направленными вдоль  $x$ ,  $y$  и  $z$ , как показано на рисунке. Если зона почти заполнена электронами, то эти поверхности соответствуют дырочному спектру.

### 16.3 Спин-орбитальное взаимодействие в 3-мерных кристаллах

В данной главе под “спин-орбитальным взаимодействием” мы будем иметь в виду взаимодействие спина электрона проводимости с его же собственным орбитальным движением в электрическом поле кристаллической решетки или в искусственно созданном электрическом поле в гетероструктуре. В рамках одноэлектронного приближения, спин-орбитальное взаимодействие описывается Гамильтонианом [2]:

$$H_{so} = \frac{\hbar^2}{4m^2c^2} [\nabla V(\mathbf{r}) \times \mathbf{p}] \sigma, \quad (16.25)$$

где  $\mathbf{p}$  и  $\sigma$  - операторы импульса и спина, соответственно. Т.о., спин-орбитальное взаимодействие (SO) возникает в тех случаях, электрон распространяется в решетке в направлении перпендикулярно градиенту электрического потенциала  $\nabla V$ , т.е. электрическому полю. Это означает, что для существования



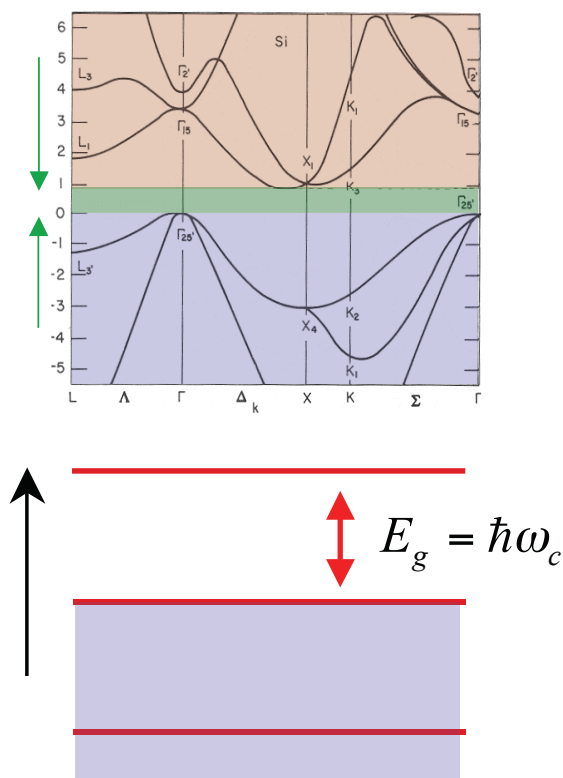


Рис. 16.4: Энергетический спектр носителей заряда в кремнии. В точке  $\Gamma$  дырочная зона шестикратно вырождена по спину. Это вырождение может быть снято в присутствии градиента потенциала

SO-взаимодействия необходимо отсутствие центра инверсии, т.е. нарушение симметрии пространственной инверсии,  $\mathbf{r} \Leftrightarrow -\mathbf{r}$ . В трехмерных решетках монокристаллических соединений, например в объемном Si, имеется симметрия инверсии и SO не возникает. На рисунке (16.4) изображен спектр носителей заряда в (111) кремнии.

В решетках же диатомных соединений с ковалентной связью, например GaAs, InSb, InAs, атомы в решетке расположе-

ны не симметрично, т.е. нет центра инверсии и пространственная симметрия инверсии нарушена; в результате, в центре элементарной ячейки имеется сильный градиент электрического потенциала  $\nabla V$ . Следовательно, для носителей дырочной зоны, расположенной в центре зоны Бриллюэна, вблизи точки  $\Gamma$  возникает сильное SO взаимодействие, снимающее спиновое вырождение в спектре носителей. Это проявляется в появлении кубических по  $k$  членов в спектре носителей. Этот случай был впервые рассмотрен Дрессельхаузом.

Появление в Гамильтониане спиновых переменных влечет за собой необходимость учета динамики спина, которая описывается временем релаксации спина  $\tau_{\text{SO}}$ . Атомное электрическое поле зависит от заряда иона, т.е. от его атомного номера  $Z$ , довольно резко  $\tau_{\text{SO}}^{-1} \propto (Z\alpha)^4$ . Присутствие здесь постоянной тонкой структуры  $\alpha = 1/137$  еще раз свидетельствует о том, что спин-орбитальное взаимодействие является релятивистским эффектом.

Для того, чтобы понять как влияет SO на спектр электронов, нужно было бы честно написать уравнение Дирака и ввести в него вектор потенциал магнитного поля, скалярный потенциал электрического поля и получить ответ. Так это делается в учебнике Ландау (теория поля [3]). Мы же вместо этого воспользуемся квазиклассическим простым рассмотрением. Пусть электрон движется со скоростью  $v$  в поле ядра, помещённого в начале неподвижной системы координат и создающего кулоновское поле  $\mathbf{E} = -\frac{\mathbf{r}}{er} \frac{\partial V}{\partial r}$ . В системе координат, связанной с движущимся электроном, наблюдатель будет видеть движущееся ядро, которое создает как электрическое, так и магнитное поле, с напряженностью  $E'$  и  $H'$ , соответственно. Из теории относительности (преобразования Лоренца) следу-

#### 16.4. Спин-орбитальное взаимодействие и спектр электронов в двумерной системе носителей с н

ет, что  $\mathbf{E}'$  и  $\mathbf{H}'$  связаны с следующими соотношениями:

$$\mathbf{E}' = \mathbf{E}, \quad \mathbf{H}' \approx -\frac{1}{c}\mathbf{v} \times \mathbf{E} = -\frac{1}{mc}\mathbf{p} \times \mathbf{E}, \quad (16.26)$$

где отброшены члены порядка  $v^2/c^2$ .

Тогда уравнение изменения спинового момента количества движения  $\mathbf{S} = \frac{\hbar}{2}\boldsymbol{\sigma}$  (связанного гиромагнитным отношением с магнитным моментом  $\boldsymbol{\mu}$ , как  $\frac{|\boldsymbol{\mu}|}{|\mathbf{S}|} = \frac{|e|\hbar}{mc}$ ) в системе координат 2 будет иметь вид:

$$\frac{d\mathbf{S}}{dt} = \boldsymbol{\mu} \times \mathbf{H}' = -\frac{e\hbar}{2m^2c^2}\boldsymbol{\sigma} \times [\mathbf{p} \times \mathbf{E}]. \quad (16.27)$$

Это уравнение соответствует взаимодействию спина электрона с электромагнитным полем, которое описывается Гамильтонианом следующего вида:

$$\mathcal{H}'_{so} = \frac{e\hbar}{2m^2c^2}\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p} \times \mathbf{E}. \quad (16.28)$$

### 16.4 Спин-орбитальное взаимодействие и спектр электронов в двумерной системе носителей с нарушенной зеркальной симметрией

Другой случай возникновения  $\nabla V$  и SO-взаимодействия даже для решетки с инверсионно-симметричной решетки возникает для двумерной системы носителей образованной в несимметричной потенциальной ямой (по оси роста  $\mathbf{z}$  был впервые рассмотрен Васько, а затем Бычковым и Рашбой [4]. В любом случае, наличие  $\nabla V$  снимает спиновое вырождение спектра и

приводит к возникновению линейного и даже кубического членов в спектре носителей  $\varepsilon(k)$ . Качественно, это легко понять с помощью следующих простых рассуждений.

Треугольная потенциальная яма, удерживающая электроны в двумерном слое, например, вблизи интерфейса Si-SiO<sub>2</sub> [5] нарушает трансляционную и зеркальную симметрию по оси  $z$ . Вследствие этого среднее электрическое поле, точнее, разность электрических полей на двух интерфейсах (перпендикулярных 2D слою), отлична от нуля

$$E_z = \left\langle \frac{\partial U}{\partial z} \right\rangle \neq 0. \quad (16.29)$$

В системе отсчета связанной с электронами движущимися в плоскости  $x - y$  со скоростью  $v_F = \hbar k_F / m^*$ , согласно преобразованию Лоренца для электромагнитного поля, возникает эффективное магнитное поле

$$\mathbf{H}^* \approx -(\hbar / m^* c) [\mathbf{k} \times \mathbf{E}]. \quad (16.30)$$

В результате, в Гамильтониане электронов 2D слоя появляется линейный по  $k$  член и в энергетическом спектре снимается вырождение по направлению спина электрона в нулевом внешнем магнитном поле [4]:

$$E^\pm(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} \pm \alpha k. \quad (16.31)$$

Поскольку СОВ определяется произведением импульса на спин (или спина на магнитное поле), то оно сохраняет симметрию по обращению времени, однако, не сохраняет симметрию инверсии ( $Z \rightarrow -Z$ ). Спин-орбитальное взаимодействие может приводить к энергетическому расщеплению состояний с противоположными спинами. Однако в твердых телах такое

16.4. Спин-орбитальное взаимодействие и спектр электронов в двумерной системе носителей с н

расщепление может быть запрещено кристаллической симметрией решетки. В кристаллах электрическое поле определяется градиентом потенциала  $\vec{E} = -\nabla V$ . В соответствии с теоремой Крамерса выполняется соотношение  $\vec{E}(\vec{k}, \uparrow) = \vec{E}(-\vec{k}, \downarrow)$ . Если кристалл имеет центр инверсии, то  $\vec{E}(\vec{k}, \uparrow) = \vec{E}(-\vec{k}, \downarrow)$  и следовательно, в кристаллах с центром инверсии не возникает расщепление уровней по спину  $\vec{E}(\vec{k}, \uparrow) = \vec{E}(\vec{k}, \downarrow)$ .

Соответствующую энергетическую щель

$$\Delta_s = E^+ - E^- = 2\alpha k_F, \quad (16.32)$$

можно рассматривать как разность энергий электронных состояний со спином, направленным в плоскости, соответственно, налево или направо относительно  $k_F$ , или, другими словами, вдоль и противоположно эффективному магнитному полю  $\mathbf{H}^* = (1/m^*c) [\mathbf{k}_F \times \nabla U]$ .

Рисунок 16.5 иллюстрирует спектр электронов в асимметричной потенциальной яме, например в треугольной яме одиночного гетероперехода или структуры МДП. Знаки  $\pm$  в формуле (16.31) соответствуют направлению спина в плоскости  $x - y$ , соответственно, налево или направо по отношению к направлению  $\mathbf{k}$ . Таким образом, в спектре возникает киральность. Спин носителей лежит в плоскости 2D слоя, но привязан (перпендикулярен) направлению импульса  $\mathbf{k}_F$ , или, эквивалентно, вдоль или противоположно эффективному магнитному полю  $\mathbf{H}^*$  в системе координат, связанной с электронами движущимися в 2D плоскости с фермиевской скоростью.

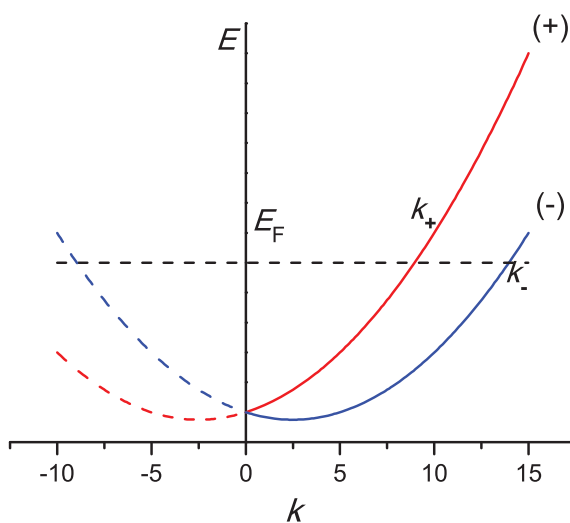


Рис. 16.5: Энергетический спектр носителей в системе с нарушенной симметрией инверсии.

## 16.5 Качественное рассмотрение электронного спектра в присутствии SO взаимодействия. Роль линейных и кубических членов в энергетическом спектре

### Спин-орбитальное взаимодействие и эффекты симметрии.

Классы универсальности симметрии случайных систем были установлены Дайсоном (Dyson [10]). В присутствии спин-орбитального взаимодействия (SO), ортогональный класс симметрии заменяется на симплектический. Применим эти сведения из статистики уровней к рассмотрению перехода металл-диэлектрик (переход типа Андерсона, по критическому беспорядку). Пусть имеется управляющий параметр - “беспорядок”  $x$  и его крити-

ческое значение  $x_c$  в точке перехода. В состоянии изолятора волновая функция локализована с некоторым радиусом локализации  $x < a$ , где  $a$ -межэлектронное расстояние. Из теории переходов Андерсона известно и интуитивно понятно, что когда мы начнем уменьшать беспорядок и приближаться к критической точке перехода, то радиус локализации волновой функции будет расходиться степенным образом:

$$\xi = \frac{1}{|x - x_c|^\omega} \quad (16.33)$$

Показатель степени  $\omega$  в расходимости радиуса локализации также как и статистике случайных матриц [10] зависит от симметрии системы, изменяясь от  $\omega = 1$  на  $\omega = 4$  при изменении класса симметрии от ортогонального на симплектический. Заметим, что состояния с большими значениями  $\omega$  труднее локализуются в системах большого размера.

Влияние SO на слабую локализацию изучалось теоретически и экспериментально [11]. Выдвигались теоретические предложения [12] о том, что в 2D системе может произойти переход металл-диэлектрик в присутствии сильного SO взаимодействия. При слабом SO взаимодействии вычисление по теории возмущений показывает, что скейлинговая функция в 2D системе асимптотически ведет себя как  $\beta(G) \sim -a/G$  в пределе большого кондактанса  $G \gg 1$ , с коэффициентом  $a > 0$  в ортогональном и  $a < 0$  в симплектическом случаях [13]. Соответственно, скейлинговая  $\beta$ -функция в симплектическом случае может стать положительной при достаточно больших значениях  $G$ . В противоположном пределе малых значений кондактанса  $G$ , при увеличении беспорядка  $G$  уменьшается, и все состояния будут локализованы даже в симплектическом случае. Критический уровень беспорядка и критическое зна-

чение  $G_c$  соответствуют точке, в которой  $\beta(G_c) = 0$ .

Это рассмотрение влияния SO-рассеяния на локализацию, однако, является довольно искусственным, поскольку раз мы начали рассматривать не свободные, а взаимодействующие электроны, то в этом же порядке по теории возмущений надо рассматривать также и эффекты Кулоновского взаимодействия. При слабом Кулоновском взаимодействии в однодолинной системе поправка от SO-взаимодействия компенсируется поправкой от Кулоновского взаимодействия и результат остается точно таким же как и в невзаимодействующей системе – логарифмическая локализационная поправка к проводимости [9]. Только при большой силе Кулоновского взаимодействия (большой величине константы Ферми-жидкостного взаимодействия  $-F_0^\sigma$ ), а также в многодолинной системе, поправка от электрон-электронного взаимодействия в триплетном канале превышает интерференционную поправку, и, тем самым, изменяет знак логарифмической добавки к проводимости. Рассмотрение этого вопроса выходит за рамки однопараметрической скейлинговой теории локализации а также данной лекции.

### 16.5.1 Эксперимент

В моноатомном кристалле объемного Si имеется симметрия зеркального отражения, поэтому в объемном Si, в отличие от GaAs, нет спин-орбитального взаимодействия. Однако, можно ожидать, что в Si-структурах МДП спин-орбитальное расщепление спектра Рашбы  $\Delta_s = 2\alpha k$  будет сильным вследствие резкой асимметрии потенциальной ямы на границе Si-SiO<sub>2</sub> [23] и, соответственно, большого среднего электрического поля  $E_z$ . Действительно, интерфейс Si-SiO<sub>2</sub> является атомно-резким с огромной высотой барьера (работа выхода в SiO<sub>2</sub> рав-



16.5. Качественное рассмотрение электронного спектра в присутствии SO взаимодействия. Роль

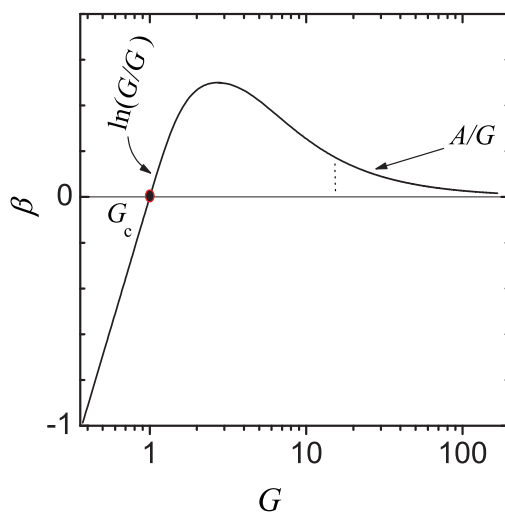


Рис. 16.6: Схематическое поведение скейлинговой функции в присутствии SO рассеяния.

на  $\sim 4\text{эВ}$ ), в то время как противоположная граница потенциальной ямы образована самосогласованным экранированным потенциалом и имеет характерный масштаб длины по нормали к поверхности – мкм.

В измерениях магнитотранспорта и циклотронного резонанса в 2D дырочной системе [28], и в 2D электронной системе [29] было выявлено спиновое расщепление в нулевом магнитном поле в гетеропереходах GaAs/AlGaAs. Аналогичный эффект экспериментально наблюдалось также в  $p$ -Si-МДП структурах [25] и в  $p$ -канальных Si-SiGe гетероструктурах. Для канала  $p$ -типа соответствующие энергетические уровни происходят из объемных состояний  $|M_j| = 3/2$ , и, следовательно, спиновые эффекты являются существенными и могут проявляться обычным образом, через перенормировку  $g$ -фактора. SO-расщепление спектра наблюдается обычно в  $p$ -GaAs/AlGaAs гетероструктурах с асимметричным удерживающим потенци-

алом [28]; хотя в последнем случае расщепление на порядок меньше, чем в  $p$ -канальных Si структурах.

В  $n$ -канальных Si-МДП структурах величина спинового расщепления  $\Delta_s \sim 0.4\text{K}$  была оценена в работе [8] путем измерения его перенормированного значения в перпендикулярном поле  $\Delta_s(H_\perp)$  и экстраполяции результатов к  $H_\perp = 0$ . Из уравнений (16.31), (16.32) следует, что расщеплению отвечает  $E_{min}^- = -2m^*\alpha/\hbar^2$ . Отсюда находим  $\alpha \approx 6 \times 10^{-6}\text{Kcm}$  – значение, близкое к GaAs/AlGaAs.

### 16.5.2 Проявления SO расщепления в квантовых осцилляциях

Кубический член в спектре приводит к сложной картине биений в спектре магнитоосцилляций, тогда как линейный по  $k$  член Рашбы приводит к простой картине биений с постоянным периодом. Благодаря этому измерения картины биений осцилляций Ш-дГ используются для определения параметра  $\alpha$ .

В присутствии перпендикулярного магнитного поля SO взаимодействие перемешивает spin-up и spin-down состояния на соседних уровнях Ландау, приводя к двум новым неравно расположенным энергетическим ветвям в спектре. Положения любых двух соседних узлов в картине биений приблизительно характеризует величину SO- члена в спектре Рашбы. Сильное SO-взаимодействие вызывает расщепление пиков магнитосопротивления и удвоение числа Холловских плато. Каждый пик в производной  $d\rho_{xy}/dH$  в изначальном случае  $\alpha = 0$  расщепляется для  $\alpha \neq 0$  на два пика.

#### Диагональная компонента сопротивления

Энергетический спектр 16.31 с линейным членом приводит к

16.5. Качественное рассмотрение электронного спектра в присутствии  $SO$  взаимодействия. Роль

ряду интересных наблюдаемых эффектов, в частности биений осцилляций Шубникова-де Гааза. Для простой интерпретации картины биений осцилляций ШдГ в 2D системе (за счет  $SO$ -расщепления) можно рассматривать систему, как состоящую из двух подзон, расщепленных на уровне Ферми на величину  $2\alpha k_F$ . Период биений нетрудно получить из выражения для спектра 16.31:

$$T_B/T_0 = n/\Delta n \approx \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\varepsilon_F}{\Delta_0} + 1}. \quad (16.34)$$

Здесь  $n = (n^+ + n^-)$  полная концентрация электронов на двух ветвях спектра, и  $\Delta n = (n^- - n^+)$ .

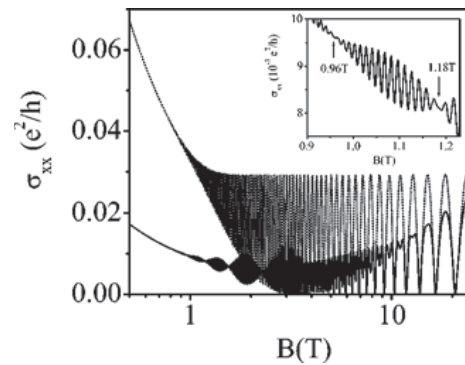


Рис. 16.7: Численные симуляции: биения квантовых осцилляций ШдГ в перпендикулярном поле, вызванные  $SO$  расщеплением спектра. Точечная кривая – результат для  $\alpha = 0$ , сплошная – для  $\alpha = 1.2 \times 10^{-6}$  мэВ см. На вставке показаны осцилляции в интервале между 4-м и 5-м узлами. Цитировано из [30]

Анализируя таким способом картину биений, показанную на рисунке 16.7 находим, что разность частот  $\pm$  осцилляций равна 4.8 Т и соответствует разности концентраций в подзонах

$\Delta n = 1.16 \times 10^{11} \text{ м}^{-2}$ , откуда следует  $\alpha = \hbar k_F \Delta n / (2m^* n) = 1.1 \times 10^{-6} \text{ мЭВ см}$ .

Биения осцилляций ШдГ впервые наблюдались экспериментально в работе [24], однако тогда еще не получили объяснения. Десять лет спустя, Рашба и Бычков [4] предложили простой физический механизм SO расщепления, приводящий к появлению двух спиновых подзон в нулевом поле и биений осцилляций в слабом поле. В работе Дорожкина и Ольшанецкого 1987г. [25] биения осцилляций были измерены на двумерной системе дырок в кремнии, впервые правильно интерпретированы и сопоставлены со спектром Рашбы-Быčkова. Пример результатов реального, а не численного эксперимента показан на Рисунке 16.8. В этом эксперименте измерялись квантовые осцилляции диагональной компоненты магнитосопротивления в асимметричной потенциальной яме InGaAs/InAlAs [27], изображенной на рисунке 16.9

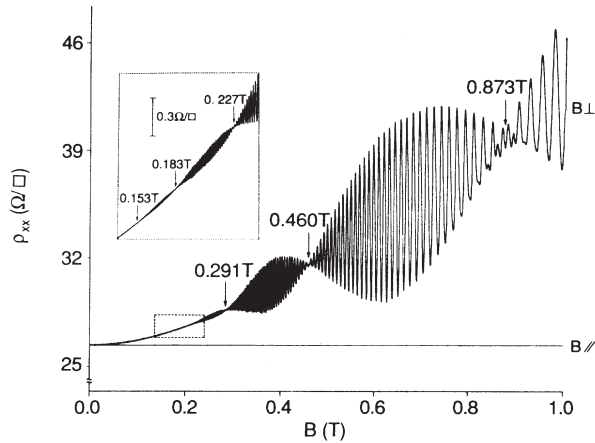


Рис. 16.8: Сопротивление  $\rho_{xx}$  в зависимости от перпендикулярного магнитного поля при температуре  $T = 0.5 \text{ К}$  [27]

16.5. Качественное рассмотрение электронного спектра в присутствии  $SO$  взаимодействия. Ролл

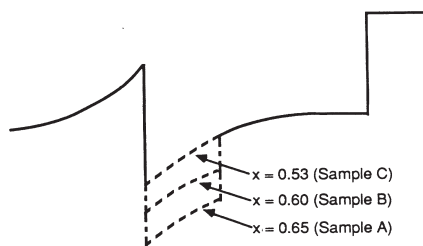


Рис. 16.9: Схематическая зонная диаграмма квантовой ямы InGaAs/InAlAs, исследовавшейся в работе [27]

Резкая асимметрия потенциальной ямы естественно привела к появлению линейного члена в электронном спектре и к биению квантовых осцилляций (Рисунок 16.8).

#### Холловское сопротивление

На рисунке 16.10 показана зависимость Холловского сопротивления  $\rho_{xy}$  от магнитного поля  $H$ . В сильном магнитном поле наблюдается квантовый эффект Холла с плато сопротивления на уровнях  $h/ie^2$ , где  $i$  - целые числа. В присутствии линейного члена в спектре, между каждыми двумя плато ( $i$ ) и ( $i + 1$ ) может появиться еще одно плато со значением сопротивления  $h/(i + 1/2)e^2$ . Протяженность этого нового плато увеличивается с ростом  $\alpha$ . Следует отметить, что эти дополнительные плато могут легко сжаться или исчезнуть при увеличении беспорядка в системе. **Придумать простое качественное объяснение полуцелым плато.**

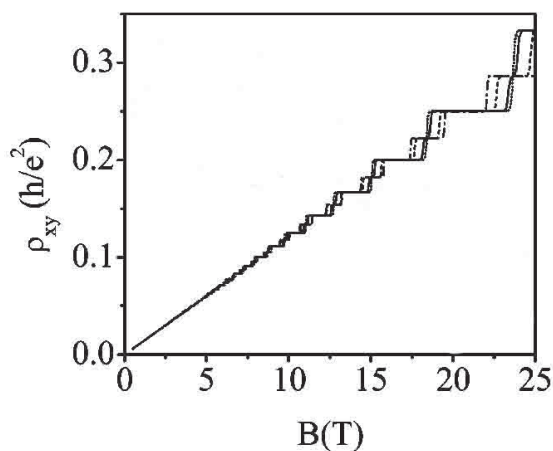


Рис. 16.10:  $\rho_{xy}$  в зависимости от магнитного поля  $B$ . Различные кривые соответствуют  $\alpha = 0, 0.6, 1.2, 2.5 \times 10^{-6}$  МэВ см. Цитировано из [30]

### 16.5.3 Определение спинового состояния одиночных электронов. Измерение времени спиновой релаксации

Наконец, мы рассмотрим пример использования SO и эффекта Кулоновской блокады в спинтронике. В то время как электроника оперирует с зарядом электрона, весьма заманчивой и перспективной считается альтернативная возможность - манипулирования со спином одиночного электрона или счетного числа электронов. В этой области науки важно уметь определять время спиновой релаксации  $T_1$  - как меру взаимодействия между двухуровневой квантовой системой и окружением. Измерения  $T_1$  ранее проводились в квантовых точках и самособранных массивов квантовых точек в GaAs и InGaAs. Для целей спинтроники, кремниевая технология предпочтительна,

кроме того, Si находится в фокусе наших лекций.

Si как потенциальный материал для спинтроники имеет ряд отличий от GaAs: слабое электрон-фононное взаимодействие (только за счет деформационного потенциала), малая величина спин-орбитального взаимодействия и отсутствие кубического члена в спектре, долинное вырождение с очень малым долинным расщеплением, и, наконец, исчезающе малое время сверхтонкого взаимодействия электронного и ядерного спинов, поскольку всего 5% атомов изотопа кремния имеют ненулевой ядерный спин. Все это не позволяет просто применить к нему результаты, полученные на GaAs и InGaAs. Измерения спиновой релаксации в квантовой точке в Si-МДП структуре – т.е. спектроскопия спинового состояния – были проведены недавно в UCLA в работе [31].

На рисунке 16.11 приведено изображение устройства и схема измерений. Вначале на поверхности окисленной Si пластины изготовлены несколько затворов, органичивающих в 2D плоскости область будущей квантовой точки. Затем поверх них выращен эпитаксиальный слой изолятора  $Al_2O_3$  и напылен глобальный затвор. Нижние удерживающие затворы подсоединены к 6 источникам напряжения LT, RT, LB, RB, P, Q, для того, чтобы сформировать квантовую точку (QD) и зарядо-чувствительный канал. В частности, затвор P, контролирует количество электронов в QD, а затворы LT и RT управляют прозрачностью левого и правого барьеров. Ток течет из области под LT в область под RT, но прямая туннельная связь этих двух подвода друг с другом мала, так что связь между ними осуществляется через QD. Затворы P, LT, RT совместно формируют одномерный зарядо-чувствительный канал. Между LT и LR прикладывается небольшое напряжение (0.8 мВ)

и с помощью широкополосного малошумящего усилителя измеряется протекающий ток.

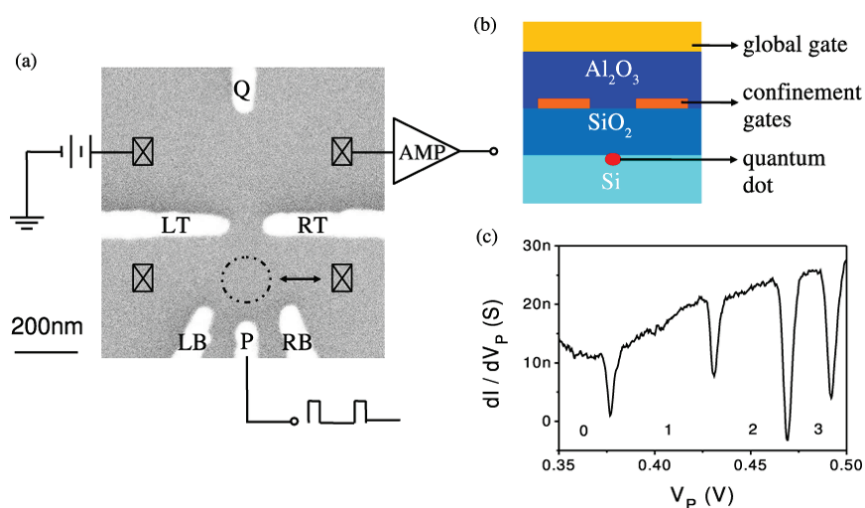


Рис. 16.11: (а) SEM-изображение QD (пунктирный кружок) и схема измерений. (б) Поперечный разрез устройства. (с) Типичная кривая сигнала дифференциальной проводимости зарядочувствительного канала в зависимости от от напряжения  $V_P$ . Цитировано из [31]

Как объяснено выше, на протекающий ток в одномерном канале “LT-RT” влияет состояние QD. Одномерный канал связан с квантовой точкой малой емкостью, так что ток в нее не втекает, но за счет емкостной связи, ток сильно зависит от заряда QD. На затвор P подается управляющее напряжение в виде плавно изменяемого постоянного напряжения и небольших по величине импульсов (3мВ, с частотой 100 кГц), как показано на рисунке 16.11. Уменьшение постоянного напряжения постепенно опустошает QD. В те моменты, когда на ней оказы-



### 16.5. Качественное рассмотрение электронного спектра в присутствии $SO$ взаимодействия. Роль

ватся целое число электронов, на регистрируемом туннельном токе видны четыре резких провала. Прямоугольные импульсы используются для того, чтобы модулировать и синфазно с импульсами детектировать процесс протекания тока, выделяя небольшое изменение тока (порядка 1%) на фоне постоянного туннельного тока. Результат измерения показывает, что QD опустошается дискретным образом ( $4 \rightarrow 3 \rightarrow 2 \rightarrow 1 \rightarrow 0$  электронов), так что после последнего провала в QD не остается больше электронов. Неэквидистантность провалов отражает спектр одноэлектронных уровней в QD.

Помимо простого подсчета числа электронов, устройство позволило измерять энергии возбужденных состояний и время релаксации спина. Например, для заполнения  $N = 2$ , основное состояние является синглетным, а возбужденное состояние отвечает триплетному с тремя различными проекциями спина. Во внешнем магнитном поле параллельном 2D плоскости 3-кратное вырождение возбужденных состояний снимается Зеемановским расщеплением.

После того как  $N = 2$  QD переводится в возбужденное состояние, начинается процесс релаксации спина в синглетное состояние, который регистрируется по временной зависимости тока. На левой верхней панели (уровнями серого) изображена диаграмма заряда-разряда QD в координатах напряжение  $V_p$  – амплитуда импульса  $\Delta V_p$ . Левая темная наклонная линия отвечает фронту импульса который начинает процесс перевода QD в возбужденное состояние. Примыкающая треугольником к линии фронта светлая линия отвечает окончанию процесса релаксации в основное состояние. Точки А В на левых панелях отражают (и позволяют измерить) разность энергии возбужденного и основного состояний  $N = 1$ . Правый нижний

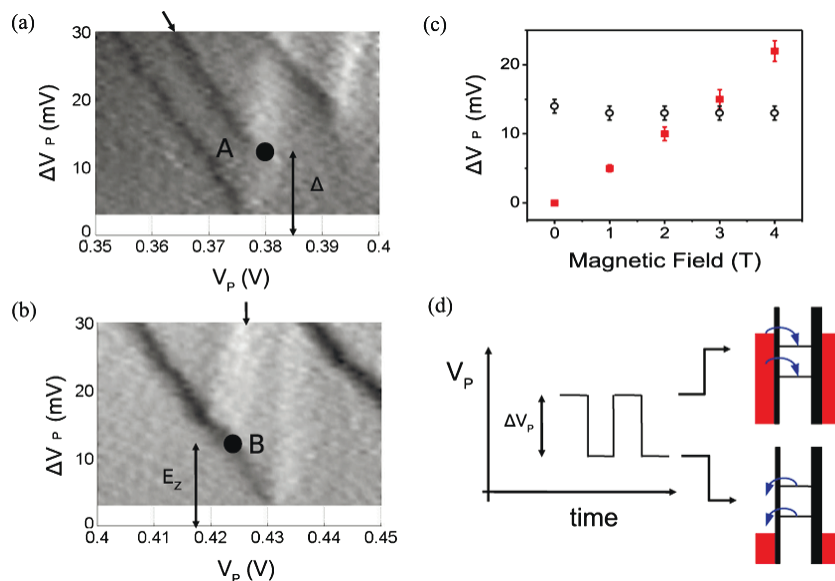


Рис. 16.12: Полутоновый рисунок производной от тока по  $\Delta V_p$  в зависимости от  $\Delta V_p$  and  $V_p$  при  $B = 3$  Т для панели (а) - переход  $N = 0 \rightarrow N = 1$ , и (b) переход  $N = 1 \rightarrow N = 2$ . (с) Амплитуда импульса для точек окончания линии возбужденного состояния – мера расстояния между уровнями QD и Зеемановского расщепления, в зависимости от магнитного поля. (d) Схематические диаграммы электрохимического потенциала, поясняющие заряд и разряд QD во время высокого и низкого напряжения импульса. Цитировано из [31]

рисунок схематически изображает энергетическую диаграмму процесса возбуждения и релаксации в QD.

Релаксация спина происходит вследствие стохастических флуктуаций электрического поля, создаваемого фононами. Фононы создают электрическое поле в GaAs за счет пьезо-механизма, а в Si- за счет деформационного потенциала. Связь же между магнитным полем электронных спинов и электрическим полем фононов обеспечивается SO взаимодействием в полупро-

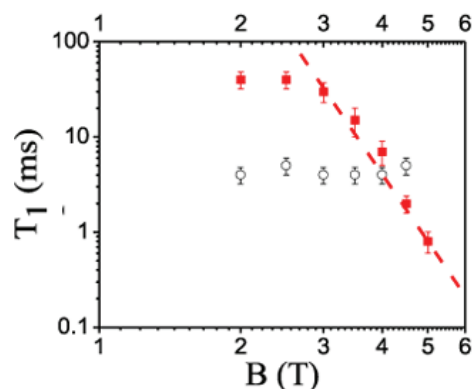


Рис. 16.13: Время релаксации для  $N=1$  (сплошные ромбики) and  $N=2$  (пустые кружки) в зависимости от магнитного поля. Цитировано из [31]

водниковых структурах. Идентифицировать механизм связи помогает внешнее магнитное поле, зависимость от которого в случае деформационного потенциала акустических фононов должна быть  $\propto B^7$ . Для QD в Si была получена подобная зависимость  $T_1$  от поля, как иллюстрирует рисунок 16.13. Как видно из рисунка при устремлении поля к нулю, время релаксации выходит на насыщение, достигая 3 и 30 мс для  $N=2$  и  $N=1$  заполнений QD, соответственно.

#### 16.5.4 Проявление СОВ: Антилокализация

Из предыдущего материала ясно, что по мере понижения температуры  $\tau_\varphi$  растет  $\propto 1/T$  или  $1/T^2$ , для доминирующего механизма электрон-электронного или электрон-фононного неупругого рассеяния, соответственно. С другой стороны,  $\tau_{SO}$  определяется рассеянием с переворотом спина на магнитных примесях или за счет затухающей прецессии при пролете с “непра-

вильным” направлением спина в градиенте потенциала. Оба механизма не должны заметно зависеть от температуры. Поэтому, при понижении температуры неизбежно должен произойти переход от соотношения  $\tau_{SP} > \tau_\varphi$  (при высокой температуре) к соотношению  $\tau_\varphi \gg \tau_{SO} \gg \tau$ . Этот переход приводит к наблюдаемым последствиям в квантовом транспорте.

При высоких температурах, определяемых соотношением  $\tau_{SP} > \tau_\varphi(T)$  спин электронов не успевает релаксировать за время путешествия по петлевой траектории. Вследствие этого электронные волны с неизменным направлением спина можно рассматривать как два бесспиновых канала распространения волны, и их интерференция приводит к эффективному “рассеянию назад” и уменьшению проводимости. Именно таким образом мы рассматривали ранее интерференционные эффекты и обсуждали результирующую слобую локализацию и сопутствующее ей отрицательное магнитосопротивление.

При низких температурах  $\tau_\varphi \gg \tau_{SO} \gg \tau$  спин электронов быстро релаксирует на длине петлевой траектории и принимает “правильное” направление за короткое время, так что электроны имеют “правильное” направление спина в течение всего времени путешествия по петлям самопересечения и деструктивная интерференция превращается в конструктивную. Рассмотрим подробнее как это происходит в двумерной системе. Можно показать, что

$$\frac{\delta\sigma}{\sigma} \approx - \int_{\tau}^{\tau_\varphi} \frac{v\lambda^2 dt}{bDt} \left( \frac{3}{2} e^{-t/\tau_{SO}} - \frac{1}{2} \right) \quad (16.35)$$

Выражение перед скобкой совпадает с интерференционным вкладом слабой локализации без SO. Первый член в скобке описывает интерференционный вклад от трех триплетных состояний со спином 1, путешествующих в обоих направлени-

ях по петлевой траектории. При высоких температурах, когда  $\tau_\varphi < \tau_{SO}$  характерные времена под интегралом  $t$  становятся меньше чем  $\tau_{SO}$ , экспоненциальный член обращается в 1 и квантовая поправка имеет ту же величину и знак, как и без учета спина, описывая эффективное “рассеяние назад”. В пределе низких температур  $\tau_\varphi$  возрастает и становится много больше чем  $\tau_{SO}$ ; экспоненциальный член в скобке стремится к нулю, и, следовательно, квантовая поправка изменяет знак, описывая теперь эффективное “рассеяние вперед”. Этот процесс принято называет антилокализацией.

### 16.5.5 СОВ на границе с ферромагнетиком. Электрическое управление спинами

На границах полупроводника с ферромагнитным слоем в гетероструктурах локальные электрические поля могут достигать  $10^{10}$  В/м, что соответствует эффективному магнитному полю анизотропии  $\sim 35$ Тл, намного превосходящему поля размагничивания в ферромагнетике. Однако, поскольку на соседних границах эти поля противоположны, то результирующая анизотропия в симметричной гетероструктуре равна нулю (рис. 16.14).

Это позволяет осуществлять электрическое переключение намагниченности: сдвигая внешним полем баланс между вкладами противоположных поверхностей, можно управлять знаком и величиной магнитной анизотропии (рис. 16.14), осуществив, таким образом, контроль магнитного состояния с помощью электрического поля. Оцениваемые величины управляющих напряжений составляют порядка 1 В, что представляет практический интерес для спинтроники.

Если устроить перенос спинов путем инъекции электронов

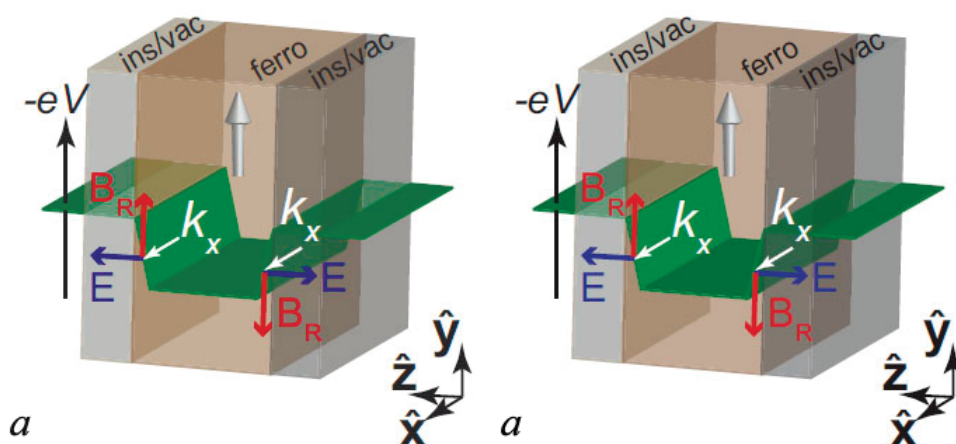


Рис. 16.14: Гетероструктура с двумя тонкими слоями ферромагнитного материала: а) симметричная гетероструктура в отсутствие электрического смещения; б) возникновение отличного от нуля результирующего магнитного поля Рашбы  $B_R$  при подаче напряжения на электроды за счет нарушения симметрии. ( $E$  – электрические поля на границах ферромагнитного слоя,  $B_R$  – эффективные поля магнитной анизотропии за счет эффекта Рашбы.)

из F-слоя в полупроводник или топ изолятор с сильным СОВ, то возникнет обратный эффект (т.н. обратный эффект Рашбы-Эдельштейна) - генерация тока зарядов.

### 16.5.6 СОВ и нелинейные эффекты

Поскольку СОВ нарушает пространственную инверсию в плоскости, то возникают нелинейные эффекты - удвоение частоты электромагнитных волн при их отражении от такой границы (Эдельштейн, 1988). Возникновение спиновой поляризации при прохождении зарядового тока в системе с СОВ - было предсказано впервые Эдельштейном в 1990г [32]. Это фактически является аналогом магнитоэлектрического эффекта в

*16.5. Качественное рассмотрение электронного спектра в присутствии SO взаимодействия. Роль*

магнитных изоляторах, в котором намагниченность возникает под действием электрического поля.

Обратный спиновый эффект Холла, т.е. возникновение фототока при рассеянии поляризованных электронов на заряженных примесных центрах в кристаллах  $\text{Ga}_{0.73}\text{Al}_{0.27}\text{As}$  n-типа был обнаружен .





# Литература

- [1] У. Харрисон “Теория псевдопотенциала” (М. Мир )
- [2] В.К. Ridley, *Quantum Processes in Semiconductors*, Clarendon Press, Oxford, 1993.
- [3] Ландау, Л. Д., Лифшиц, Е. М. Теория поля. — Издание 7-е, исправленное. — М.: Наука, 1988. — 512 с. — («Теоретическая физика», том II). — ISBN 5-02-014420-7
- [4] Ю.А. Бычков, Э.И. Рашба, Письма в ЖЭТФ, **39**, 66 (1984); [JETP Lett. **39**, 78 (1984)].
- [5] T.Ando, Phys. Rev B **40**, 5325 (1989).
- [6] E. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Licciardello, and T.V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979).
- [7] M.J. Uren, R.A. Davies, M. Kaveh, and M. Pepper, J. Phys. C: Solid State Phys. **14**, 5737 (1981).
- [8] V.M. Pudalov, S.G. Semenchinskii, and V.S. Edel'man, ZhETF **89**, 1870 (1985); [Sov.Phys. JETP **62**, 1079 (1985)].
- [9] B.L. Altshuler, A.G. Aronov, in: *Electron Electron Interaction in Disordered Systems*, A.L.Efros and M.Pollak eds., North-Holland, Amsterdam, 1985.

- [10] F.J. Dyson, J. Math. Phys., **3**, 140 (1962); **3**, 157 (1962); **3**, 166 (1962); **3**, 1191 (1962); **3**, 1199 (1962).
- [11] F.G. Pikus, G.E. Pikus, Cond-mat/9606108. Y.B. Lyanda-Geller, A.D. Mirlin, Phys. Rev. Lett. **72**, 1894 (1994). W. Knap et al. Phys. Rev B **53**, 3912 (1996).
- [12] T.Ando, Phys. Rev B **40**, 5325 (1989).
- [13] S. Hikami, A.I. Larkin, Y. Nagaoka, Progr. Theor. Phys., **63**, 707 (1980). S. Hikami, *ibid* **64**, 1425 (1980).
- [14] V.M. Pudalov, p.34 in: Proc. Intern. Conf. on Electron Localization and Quantum Transport in Solids, Jaszowiec, Poland, 1996. Ed. by T.Dietl, Inst. of Physics PAN, Warsaw (1996).
- [15] J.P. Eisenstein, H.L. Störmer, V. Narayanamurti, A.C. Gossard, and W. Wiegmann, Phys. Rev. Lett. **53**, 2579 (1984).
- [16] F.W. Van Keuls, X.L. Hu, H. Mathur, H.W. Jiang, and A.J. Dahm, *ibid*, p.33.
- [17] F.G. Pikus, A.L. Efros, *ibid*, p.10.
- [18] D. Belitz, T.R. Kirkpatrick, Cond-mat/9705023.
- [19] V. Dobrosavljevic, E. Abrahams, E. Miranda, and S. Chakravarty, Cond-mat/9704091.
- [20] D. Simonian, S.V. Kravchenko, and M.P. Sarachik, Cond-mat/9704071.
- [21] V.M. Pudalov, G. Brunthaler, A. Prinz, and G. Bauer, Pis'ma ZhETF, **65**, 887 (1997).

- [22] Д. И. Блохинцев, Квантовая механика, § 49.
- [23] T. Ando, A. B. Fowler, F. Stern, Electronic properties of two-dimensional systems. RMP (1982).
- [24] K. von Klitzing, G. Landwehr, G. Dorda, Sol. State Commun., **14**, 387 (1974).
- [25] S. I. Dorozhkin, E. B. Ol'shanetskii, JETP Lett. **46**, 502 (1987). S. I. Dorozhkin, Sol. St. Commun. **72**, 211 (1989).
- [26] C. M. Hu, J. Nitta, T. Akazaki, H. Takayanagi, J. Osaka, P. Pfeffer, and W. Zawadzki, Phys. Rev. B **60**, 7736, (1999).
- [27] B. Das, D. C. Miller, S. Datta, R. Reifenger, W. P. Hong, P. K. Bhattacharya, J. Singh, and M. Jaffe, Phys. Rev. B **39**, 1411 (1989).
- [28] H. L. Störmer, Z. Schlesinger, A. Chang, D. C. Tsui, A. C. Gossard, and W. Wiegmann, Phys. Rev. Lett. **51**, 126 (1983). J. P. Eisenstein, H. L. Störmer, V. Narayanamurtu, A. C. Gossard, and W. Wiegmann, Phys. Rev. Lett. **53**, 2579 (1984).
- [29] D. Stein, K. v. Klitzing, and G. Weimann, Phys. Rev. Lett. **51**, 130 (1983).
- [30] X. F. Wang and P. Vasilopoulos, Magnetotransport in a two-dimensional electron gas in the presence of spin-orbit interaction Phys. Rev. B **67**, 085313 (2003)
- [31] M. Xiao, M.G. House, H.W. Jiang, Measurement of the Spin Relaxation Time of Single Electrons in a Silicon Metal-Oxide-Semiconductor-Based Quantum Dot, Phys. Rev. Lett. **104**, 096801 (2010).

- [32] V.M. Edelstein, SPIN POLARIZATION OF CONDUCTION ELECTRONS INDUCED BY ELECTRIC CURRENT IN TWO-DIMENSIONAL ASYMMETRIC ELECTRON SYSTEMS, Sol. St. Commun. **73**, No. 3, 233-235 (1990).