

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт
радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова

Российской академии наук

На правах рукописи



Девизорова Жанна Алексеевна

Интерфейсные эффекты в электронном спектре ограниченных полупроводников и полуметаллов

01.04.10 – Физика полупроводников

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель

д. ф.-м. н.

Волков Владимир Александрович

Москва – 2017

Оглавление

Введение	4
Обзор литературы	12
1. Спиновое расщепление спектра 2D электронов в квантовых ямах на основе соединений A_3B_5	12
2. Вейлевские полуметаллы	17
3. Краевые состояния в графене	26
Глава 1. Интерфейсное спин-орбитальное взаимодействие в квантовых ямах на основе соединений A_3B_5	32
1.1. Граничное условие для огибающих функций электрона проводимости на гетероинтерфейсе	33
1.2. Влияние интерфейса на спиновое расщепление спектра 2D состояний в отсутствие магнитного поля	41
1.3. Интерфейсные вклады в зеемановское расщепление уровней Ландау	47
1.4. Сравнение с экспериментом	54
Глава 2. Аналитическая модель поверхностных состояний в вейлевском полуметалле	57
2.1. Граничное условие для огибающих функций	58
2.2. Электронный спектр полуплоскости	61
2.3. Электронный спектр полуплоскости в четырехдолинном приближении	66
Глава 3. Интерфейсные эффекты для графеновой антиточки	70
3.1. Время жизни краевых состояний на полуплоскости графена с шероховатым краем	70
3.2. Локальная плотность состояний вблизи антиточки	72

3.3. Спектр краевых состояний и сечение рассеяния на заряженной антиточке	75
Заключение	80
Список сокращений и условных обозначений	82
Список литературы	83
Приложение А. g -фактор электрона проводимости	95

Введение

Актуальность темы исследования. Зачастую в задачах квантовой механики и физики конденсированного состояния пренебрегается эффектами, связанными с существованием границ раздела. Это приближение хорошо работает для массивных образцов, однако в системах пониженной размерности граничные эффекты могут оказаться существенными. Так, например, наличие границ приводит к размерному квантованию уровней энергии и образованию двумерного (2D) электронного газа в квантовых ямах и структурах металл-диэлектрик-полупроводник, которые активно используются для создания современных электронных устройств. Одной из систем, где существенно проявляются интерфейсные эффекты, являются квантовые ямы на основе GaAs/AlGaAs. Такие квантовые ямы перспективны для создания приборов спинтроники, активно развивающегося в настоящее время раздела электроники. Актуальная задача в этом направлении состоит в создании и сохранении спиновой поляризации в течение достаточного для работы прибора времени, чему препятствует наличие спин-орбитального взаимодействия. Как было показано в работе [1], спиновая поляризация может сохраняться, если два доминирующих вклада в спин-орбитального взаимодействия (Рашбы и Дрессельхауза), равны друг другу, чего можно добиться путем управления величиной взаимодействий. Для эффективного управления необходимо знать все механизмы, влияющие на их величину. В связи с этим, исследование одного из таких механизмов, а именно, спин-орбитального взаимодействия с атомарно резким потенциалом гетероинтерфейса, которому посвящена глава настоящей диссертации, является актуальной задачей. С целью объяснения экспериментальных данных по электронному парамагнитному резонансу в квантовых ямах указанного типа [2, 3] в диссертации также рассмотрен вопрос о влиянии такого взаимодействия на спектр 2D электронов в магнитном поле.

Другим ярким примером влияния границ раздела на свойства нанострук-

тур является появление краевых и поверхностных состояний на границах 2D и 3D систем, соответственно. Особые состояния электронов на поверхности кристалла были теоретически предсказаны более полувека назад [4, 5], но стали интенсивно изучаться экспериментально сравнительно недавно, после появления графена и топологических изоляторов. Краевые состояния в графене образуют дополнительный проводящий канал вблизи его краев [6] и влияют на транспортные и оптические свойства графеновых структур, что может быть использовано при создании новых электронных устройств на их основе. В связи с этим, изучение свойств и проявлений краевых состояний в подобных структурах представляется актуальной задачей.

В последнее время стремительно развиваются и являются одной из самых «горячих» точек современной физики исследования поверхностных состояний в так называемых вейлевских полуметаллах, трёхмерных аналогах графена. Электроны в этих материалах обладают ультрарелятивистским законом дисперсии и описываются уравнением Вейля. Существование вейлевских фермионов было предсказано ещё в начале XX века, однако огромные усилия по их обнаружению долгое время были безрезультатными. Лишь в 2015 году они были обнаружены экспериментально [7–10], но не в качестве фундаментальных частиц в физике высоких энергий, а как элементарные возбуждения в твердых телах, которые и получили название вейлевских полуметаллов. Интерес к вейлевским полуметаллам также связан с их нетривиальной топологией, которая гарантирует существование в ограниченном образце поверхностных состояний с весьма экзотическим законом дисперсии. Ферми-контур таких состояний, которые получили название ферми-арок, не замкнуты и имеют форму дуг, соединяющих вейлевские точки разных долин. До сих пор ферми-арки описывались теоретически в рамках сложных и непрозрачных компьютерных расчетов "из первых принципов". Одна из глав настоящей диссертации посвящена построению аналитической модели таких состояний, которая позволяет сравнительно просто учитывать влияние электрических и магнитных полей на вейлевские фермио-

ны.

Цели и задачи диссертационной работы: Разработка теории интерфейсного спин-орбитального взаимодействия и анализ его влияния на спиновое расщепления электронного спектра в гетероструктурах на основе соединений (001) A_3B_5 . Построение модели поверхностных состояний в вейлевских полуметаллах в рамках метода огибающих функций. Изучение свойств краевых состояний, локализованных на антиточке в графене, и явлений, в которых они проявляются.

Для достижения поставленных целей были решены следующие задачи:

1. Получение граничного условия для огибающих функций зоны проводимости на атомарно резком гетероинтерфейсе типа GaAs/AlGaAs. Вывод эффективного 2D спинового гамильтониана электрона как в отсутствие магнитного поля, так и в наклонном магнитном поле с учетом вкладов от гетероинтерфейса.
2. Вывод граничного условия для эффективных волновых функций на поверхности вейлевского полуметалла в двухдолинном приближении. Вычисление спектров поверхностных состояний для полубесконечной системы. Обобщение модели на четырехдолинный случай.
3. Расчет локальной плотности состояний вблизи единичной антиточки в графене. Изучение спектра краевых состояний и сечения рассеяния на заряженной антиточке.

Научная новизна работы. В диссертации предложен новый механизм спин-орбитального взаимодействия в гетероструктурах на основе соединений (001) A_3B_5 , учет которого позволяет корректно описывать экспериментальные данные по электронному парамагнитному резонансу в квантовых ямах GaAs/AlGaAs.

Предложено новое теоретическое описание поверхности вейлевского полуметалла, разработана теория поверхностных состояний в этих материалах, ко-

торая согласуется с экспериментами по фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением.

Впервые рассчитана локальная плотность состояний на антиточке в графене, которая поддерживает краевые состояния.

Положения, выносимые на защиту:

1. Предложено граничное условие для огибающих функций зоны проводимости на атомарно резком и непроницаемом гетеробарьере типа (001) GaAs/AlGaAs, которое удовлетворяет общим физическим требованиям самосопряженности и инвариантности по отношению к инверсии времени и учитывает спин-орбитальное взаимодействие как с объемным, так и с гетероинтерфейсным кристаллическим потенциалом, отсутствие центра инверсии в объемном кристалле и симметрию интерфейса C_{2v} .
2. Построенная теория влияния интерфейсного спин-орбитального взаимодействия на спиновое расщепление энергетического спектра 2D электронов в магнитном поле количественно объясняет экспериментальные данные по электронному парамагнитному резонансу в гетероструктуре (001) GaAs/AlGaAs. В отсутствие магнитного поля интерфейсное спин-орбитальное взаимодействие заметно компенсирует вклад объемного механизма Дрессельхауза и усиливает вклад механизма Бычкова-Раппбы.
3. Предложено граничное условие для огибающих функций на поверхности вейлевского полуметалла, удовлетворяющее требованиям самосопряженности и симметрии, а также учитывающее внутривалинное и междолинное интерфейсное взаимодействие.
4. Развитая аналитическая модель поверхностных состояний в вейлевских полуметаллах позволяет описать экспериментальные данные. Междолинное интерфейсное взаимодействие играет ключевую роль в формировании поверхностных состояний типа ферми-арок.
5. Локальная плотность состояний вблизи антиточки в графене, поддержива-

ющей квазистационарные краевые состояния, резонансно зависит от энергии. При удалении от антиточки высота резонансных пиков уменьшается по степенному закону с показателем, пропорциональным номеру резонанса.

Степень достоверности и апробация результатов. Достоверность представленных в диссертации результатов подтверждается тем, что при расчётах использовались проверенные методы теоретической физики, а результаты согласуются с экспериментальными данными. Полученные теоретические результаты признаны научной общественностью при обсуждениях на российских и международных научных конференциях, а также подтверждены положительными рецензиями опубликованных статей в научных журналах.

Результаты исследований, вошедших в диссертацию, докладывались на 21-st International Conference on Electronic Properties of Two-Dimensional Systems (Sendai, Japan, July 26-31, 2015), Graphene Week 2016 (Warsaw, Poland, June 13-17, 2016), 9-th Advanced research workshop fundamentals of electronic nanosystems «Nano Piter 2014» (Saint Petersburg, Russia, June 21-27, 2014), 11-ой, 12-ой и 13-ой Российских конференциях по физике полупроводников (Санкт-Петербург, 16-20 сентября 2013 г., Ершово, 21-25 сентября 2015 г. и Екатеринбург, 2-10 октября 2017 г.), 19-ом и 21-ом Международных симпозиумах «Нанозлектроника» (Нижний Новгород, 10-14 марта 2015 г. и 13-17 марта 2017 г.), 13-ой и 14-ой Конференциях молодых ученых «Проблемы физики твердого тела и высоких давлений», (Сочи, 12-21 сентября 2014 г. и 11-20 сентября 2015 г.), 10-ой, 11-ой и 13-ой Молодежных конференциях им. И. Анисимкина (Москва, 21-22 октября 2013 г., 20-21 октября 2014 г. и 24-25 октября 2016 г.), 15-ой Школе молодых ученых «Актуальные проблемы физики» (Москва, 16-20 ноября 2014 г.).

Публикации. Материалы диссертации опубликованы в 21 печатных работах, включая 4 статьи в рецензируемых журналах, включенных в систему Web

of Science и входящих в перечень изданий, рекомендованных ВАК Минобразования и науки РФ [11–14], а также 17 публикаций в сборниках трудов и тезисов конференций [15–31].

Личный вклад автора. Автор принимал участие в постановке задач и обсуждении результатов. Все расчеты проводились автором лично.

Структура диссертации. Диссертация состоит из введения, обзора литературы, 3-х глав, заключения, библиографии и 1-го приложения. Работа содержит 99 страниц, включая 18 рисунков, 2 таблицы и список литературы из 125 источников.

Обзор литературы состоит из трёх разделов. Первый раздел посвящен изложению известных теоретических и экспериментальных результатов по спиновому расщеплению спектра 2D электронов в квантовых ямах на основе соединений A_3B_5 . Во втором разделе вводится понятие вейлевского полуметалла и дается обзор работ, посвященных как объемным свойствам этих материалов, так и необычным поверхностным состояниям в них. В третьем разделе приводятся результаты работ по краевым состояниям в графене.

Первая глава состоит из 4 разделов и посвящена исследованию влияния атомарно резкого гетероинтерфейса на спиновое расщепление 2D состояний в зоне проводимости гетероструктур на основе (001) A_3B_5 без магнитного поля и в наклонном магнитном поле, содержащем квантовую компоненту. В разделе **1.1** с использованием требования эрмитовости многозонного kr гамильтониана в ограниченной области, инвариантности задачи по отношению к обращению времени и симметричных аргументов получено общее граничное условие для огибающих функций электрона проводимости на единичном гетероинтерфейсе типа GaAs/AlGaAs с симметрией C_{2v} . Раздел **1.2** посвящен теории спинового расщепления спектра 2D электронов в отсутствие магнитного поля. Рассмотрена односторонне легированная квантовая яма GaAs, в которой электроны прижаты внутренним электрическим полем к гетероинтерфейсу (001)

GaAs/AlGaAs. Вычислены вклады от интерфейсного спин-орбитального взаимодействия в параметры Рашбы и Дрессельхауза. В этом же разделе изучается узкая квантовая яма, в которой энергия размерного квантования существенно превосходит энергию взаимодействия с электрическим полем. В такой системе рассчитана перенормировка параметров Рашбы и Дрессельхауза за счет интерфейсного спин-орбитального взаимодействия на двух гетерограницах. Показано, что неэквивалентность интерфейсов приводит к отличию от нуля параметра Рашбы и, как следствие, анизотропии спинового расщепления даже в отсутствие электрического поля. В разделе **1.3** исследуется спиновое расщепление электронного спектра на гетеропереходе в наклонном магнитном поле и выводятся выражения для компонент тензора g -фактора с учетом интерфейсных перенормировок. Раздел **1.4** посвящен сравнению построенной теории спинового расщепления уровней Ландау с экспериментальными данными по электронному парамагнитному резонансу в широких квантовых ямах GaAs/AlGaAs с большим встроенным электрическим полем. Показано, что качественное и количественное описание экспериментальных данных возможно лишь при учете всех интерфейсных вкладов в g -фактор. Рассчитаны интерфейсные константы, а также параметры Рашбы и Дрессельхауза, интерфейсные вклады в которые по величине оказались сравнимы с объемными.

Вторая глава, содержащая 3 раздела, посвящена построению аналитической модели поверхностных состояний в вейлевском полуметалле, которая описывает экспериментальные данные по фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением и легко обобщается на наличие внешних полей. Объемный спектр с двумя вейлевскими точками описывается эффективным двухдолинным kr гамильтонианом. Для описания поверхностных состояний этот гамильтониан должен быть дополнен граничным условием на поверхности образца. В разделе **2.1** из общезначимых требований получено указанное граничное условие для полубесконечной системы, которое учитывает как внутридолинное, так и междолинное интерфейсное взаимодействие. В разделе **2.2** вычислены спектры и про-

анализированы ферми-контура поверхностных состояний на поверхности (001) вейлевского полуметалла. Без учета междолинного взаимодействия ферми-контура поверхностных состояний – это лучи, исходящие из проекций объемных вейлевских точек. В зависимости от величины параметра, характеризующего внутридолинное интерфейсное взаимодействие, эти лучи либо не пересекаются, либо имеют одну точку пересечения. В первом случае при учете междолинного взаимодействия, величина которого выше порогового значения, происходит смыкание лучей с образованием ферми-арки. В другом случае из-за междолинного взаимодействия лучи рассталкиваются в точке пресечения, также формируя ферми-арку. Лучи, которые не образуют ферми-арку в двухдолинном приближении, могут, однако, связывать удаленные долины зоны Бриллюэна. Такая возможность качественно продемонстрирована в разделе **2.3**, где рассмотрено взаимодействие между двумя парами долин в рамках простейшего четырехдолинного приближения.

В **третьей** главе, состоящей из 3 разделов, изучаются интерфейсные эффекты для графеновой антиточки. В разделе **3.1** показано, что отклонение края от линейного приводит к конечности времени жизни краевых состояний. В разделе **3.2** вычислена локальная плотность состояний вблизи единичной антиточки в графене, которая поддерживает квазистационарные краевые состояния. Показано, что локальная плотность состояний имеет резонансный характер. Рассчитаны характеристики резонансов. Раздел **3.3** посвящен заряженной антиточке. Вычислена перенормировка спектра краевых состояний из-за наличия заряда и сечение рассеяния электронов.

В **Заключении** сформулированы основные результаты работы.

Формулы и рисунки в диссертации нумеруются по главам в стиле №главы. №формулы (в Обзоре литературы №главы отсутствует), нумерация литературы и сокращения единые для всего текста. Список сокращений приведен после заключения, кроме того, в каждой главе при первом упоминании приводится расшифровка сокращения.

Обзор литературы

1. Спиновое расщепление спектра 2D электронов в квантовых ямах на основе соединений A_3B_5

1.1. Спиновое расщепление в отсутствие магнитного поля

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

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

Здесь x, y, z – кубические оси, причем z – ось размерного квантования, σ_x, σ_y – матрицы Паули. Первое слагаемое обусловлено отсутствием центра инверсии в объемном кристаллическом потенциале (терм Дрессельхауза [32–35]). Второе слагаемое в (1) (терм Бычкова-Рашбы [36], известное также как взаимодействие Рашбы) связано с асимметричностью потенциала структуры $V(z)$.

При выводе явных выражений для констант Дрессельхауза α_{BIA} и Рашбы α_{SIA} чаще всего применяется метод эффективных волновых функций, которые являются огибающими полной волновой функции. В рамках этого приближения константы определяются обычно выражениями [32–35]

$$\alpha_{BIA}^{(0)} = \frac{\gamma_c \langle \hat{p}_z^2 \rangle_{00}}{\hbar^3}, \quad \alpha_{SIA}^{(0)} = a_{SO} \langle \partial_z V \rangle_{00}, \quad (2)$$

где γ_c – константа кубичного по импульсу спинового расщепления зоны проводимости объемного полупроводника типа A_3B_5 (объемная константа Дрессельхауза), a_{SO} – константа, определяемая параметрами зонной структуры и величиной спин-орбитального взаимодействия. Усреднение ведется по огибающим функциям основной 2D подзоны. Однако помимо объемных вкладов, определяемых (2), константы Дрессельхауза и Рашбы могут содержать дополнительных

интерфейсные слагаемые, вывод которых является одной из целей настоящей диссертации.

1.2. Проблема граничных условий

При выводе выражений (2) существенно использовано, что метод огибающих функций (ОФ) применим во всем пространстве, включая область гетерограниц [37, 38]. Однако этот метод применим для описания только плавных (на атомарных масштабах) полей и не годится для реального случая атомарно резких границ раздела. Информацию о микроскопическом строении гетерограницы можно учесть с помощью соответствующих граничных условий (ГУ) для ОФ.

Проблема ГУ имеет долгую историю. Теоретические работы по таким ГУ можно разбить на две группы. Работы первой группы, наиболее многочисленной, посвящены выводу "двухсторонних" ГУ, связывающих ОФ и их производные слева и справа от интерфейса. Они содержат разные подходы к решению математических проблем, связанных, в частности, с возможным сингулярным поведением ОФ на гетерогранице [35, 38–43].

Работы второй группы посвящены выводу "односторонних" ГУ на интерфейсе кристалл-высокий барьер (в частности, на границе кристалл-вакуум). Задачи этого типа возникают, например, при описании поверхностных (интерфейсных) состояний таммовского типа. Глава (1.1) настоящей диссертации относится ко второй группе, сравнительно малочисленной.

Кратко опишем некоторые результаты из статей второй группы. В бесспиновом случае микроскопический вывод ГУ для ОФ на скачкообразной границе полупроводник ($z \geq 0$) – вакуум ($z < 0$) был впервые, видимо, представлен еще в работах [44, 45]. Выведенные там ГУ содержат граничные параметры, аналитически (но сложным образом) выражающиеся через полную зонную структуру полупроводника, аналитически продолженную в область комплексных квазиимпульсов. Численное определение этих параметров остается нерешенной проблемой. В однозонном пределе ГУ представляет собой линейную связь между

функцией и производной с единственным граничным параметром размерности длины, которая ниже обозначена буквой R . Эта длина имеет смысл глубины локализации мелкого таммовского состояния, когда оно существует (для этого необходимо выполнение условия $R > 0$). В работе [46] представлен намного более простой вывод этого же ГУ из условия эрмитовости эффективного гамильтониана для ОФ на полупространстве, ограниченном непроницаемым барьером. В рамках такого феноменологического подхода параметр R должен определяться из эксперимента. Модель высокого барьера применима, когда интерфейсная длина R велика по сравнению с длиной проникновения под барьер. Влияние спин-орбитального взаимодействия на ГУ для ОФ и спиновое расщепление 2D состояний в зоне проводимости центроинверсного полупроводника было рассмотрено в работе [47] в рамках обобщения подхода [46]. Непараболическое обобщение ГУ [47] и терма Бычкова-Рашбы в асимметричной квантовой яме с бесконечными барьерами представлено в работе [48].

1.3. Константы спин-орбитального взаимодействия

К настоящему времени опубликовано большое количество теоретических и экспериментальных работ, посвященных как вычислению, так и измерению объемных параметров типа Дрессельхауза (γ_c) и типа Рашбы (a_{SO}) самыми разными методами в квантовых ямах (КЯ) с 2D электронным газом на основе (001) GaAs/Al_xGa_{1-x}As, см. обзоры [33, 35, 49]. Во многих работах отмечался сильный разброс экспериментальных значений и расхождение с теоретическими результатами. Параметр $|\gamma_c|$ изменяется в несколько раз, от 26 [50] и 28 [51] до 11 [52] (в единицах эВ \times Å³). Парадоксально, но разброс увеличивается с применением все более изощренных экспериментальных методик (см. Рис. 1). Так, значения $|\gamma_c|$, извлеченные из сравнения с существующими теориями, в работах последних лет достигают значений (в тех же единицах) 6 [53], 5 [1?], 11 [54, 55], 12 [56] и даже 3 [57]. Экспериментальных данных по a_{SO} намного меньше, но их разброс тоже впечатляет: от 4 [58] до 7 [1] и даже 25 [59] (в

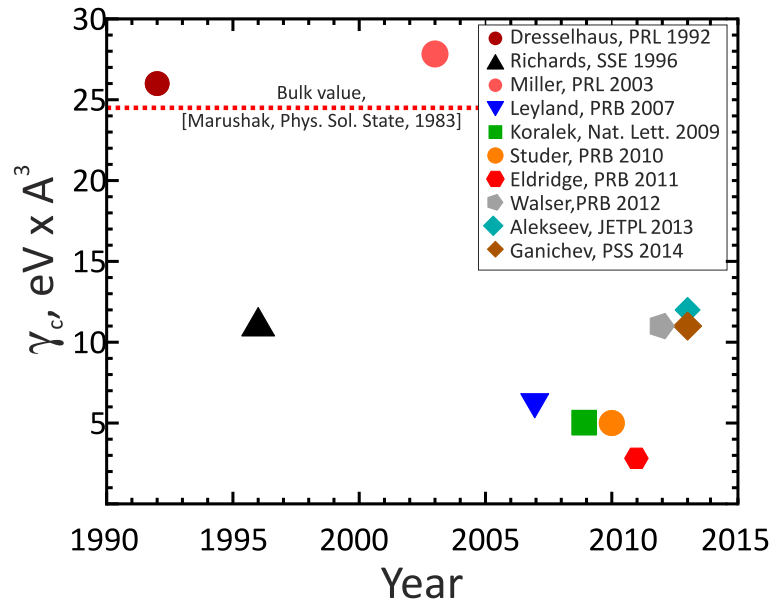


Рис. 1. Значения объемной константы Дрессельхауза γ_c , извлеченные из сравнения экспериментальных данных, полученных в разные годы в КЯ на основе (001) GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, с существующими теориями. Красная пунктирная линия соответствует значению γ_c , полученному для массивного образца GaAs.

единицах $\text{\AA}^2/\hbar$). В то же время разброс данных по γ_c минимален в массивных образцах GaAs. Например, данные одной из ранних работ [60] $|\gamma_c| = 24,5 \text{ эВ} \times \text{\AA}^3$ согласуются с kp -теорией, см. также [61], и не подверглись за 30 лет сильной ревизии. Знак γ_c заслуживает отдельного обсуждения.

Такое состояние исследований нельзя признать удовлетворительным. В качестве одной из возможных причин в ряде работ указывалось на возможность существования интерфейсного спин-орбитального взаимодействия, см. ссылки в [1, 35, 49, 62]. Подобное взаимодействие может быть, в частности, связано с инверсионной асимметрией интерфейса. Однако попытки построения теории интерфейсного спин-орбитального взаимодействия адекватной эксперименту, наталкиваются на трудности, связанные как с недостатком информации о строении атомарно резкого гетероинтерфейса на атомных масштабах, так и с неприменимостью метода плавных огибающих функций на нем. В настоящей диссертации сделана попытка построения феноменологической теории интерфейсного спин-орбитального взаимодействия общего вида, количественно описывающей

эксперимент.

1.4. g -фактор электрона проводимости

Обычно величина зеемановского расщепления линейно зависит от магнитного поля, причем коэффициент пропорциональности равен магнетону Бора μ_B , умноженному на g -фактор. Для электрона в вакууме $g = 2$. В кристалле из-за спин-орбитального взаимодействия g -фактор электрона (g^*) отличается от своего значения в вакууме, и существенно зависит от зонной структуры [63]. Однако в кубических кристаллах он по-прежнему является изотропным. В гетероструктурах с симметричной квантовой ямой, выращенной в направлении $z \parallel [001]$, компоненты тензора g вдоль и поперек ямы становятся различными [64]. Эффект объясняется непараболичностью зоны проводимости [65]. В гетероструктурах с асимметричной квантовой ямой, появляются также отличные от нуля недиагональные (в кубических осях) компоненты тензора g [66].

В недавних прецизионных измерениях спинового резонанса в GaAs квантовых ямах в режиме квантового эффекта Холла [2, 3] была обнаружена зависимость g -фактора от квантующей компоненты магнитного поля B_z и от номера N соответствующего уровня Ландау. Такое необычное поведение $g(B_z)$ частично мотивировало постановку задачи в настоящей диссертации. Эксперименты проводились в сравнительно широких односторонне легированных КЯ. Движение электронов в таких КЯ ограничено гетероинтерфейсом (001) GaAs/ $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$, с одной стороны, и внутренним электрическим полем, с другой. Методом электронного парамагнитного резонанса (ЭПР) измерены компоненты тензора g и его производные по квантующей компоненте магнитного поля [2, 3, 12]. Количественное описание этих экспериментальных данных является одной из целей данной диссертации.

2. Вейлевские полуметаллы

Вейлевские полуметаллы расширяют топологическую классификацию материалов за пределы изоляторов и демонстрируют довольно экзотические поверхностные состояния. В последнее время эти материалы активно изучались теоретически [67–74], и, наконец, недавно фаза вейлевского полуметалла была экспериментально обнаружена в материалах с нарушенной симметрией по отношению к пространственной инверсии арсениде тантала [7–9] и арсениде ниобия [10].

2.1. Объемные свойства

Вейлевские полуметаллы – 3D материалы, в которых зона проводимости и валентная зона касаются в особых точках зоны Бриллюэна (вейлевских точках), вблизи этих точек спектр квазичастиц линейный (см. Рис. 2а) и описывается гамильтонианом

$$\hat{H} = \pm v \boldsymbol{\sigma} \mathbf{p}, \quad (3)$$

где $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ – набор матриц Паули, $\mathbf{p} = (p_x, p_y, p_z)$ – квазиимпульс электрона, отсчитываемый от соответствующей вейлевской точки, v – скорость Ферми.

Подобный спектр в 2D реализуется в графене, поэтому вейлевские полуметаллы часто называют 3D аналогами графена. Однако в отличие от графена, где вырождение, связанное с дираковской точкой, может быть снято возмущением, пропорциональным σ_z , существование и защищенность вейлевских точек в вейлевских полуметаллах следует из топологических соображений и не требуют никакой дополнительной симметрии, кроме трансляционной. Действительно, отсутствие члена с σ_z в гамильтониане графена следует из наличия в системе двух симметрий: по отношению к пространственной инверсии (\hat{I} -симметрия) и по отношению к обращению времени (\hat{T} -симметрия). При этом из симметрии по отношению к пространственной инверсии следует

$$H(\mathbf{p}) = \sigma_x H(-\mathbf{p}) \sigma_x, \quad (4)$$

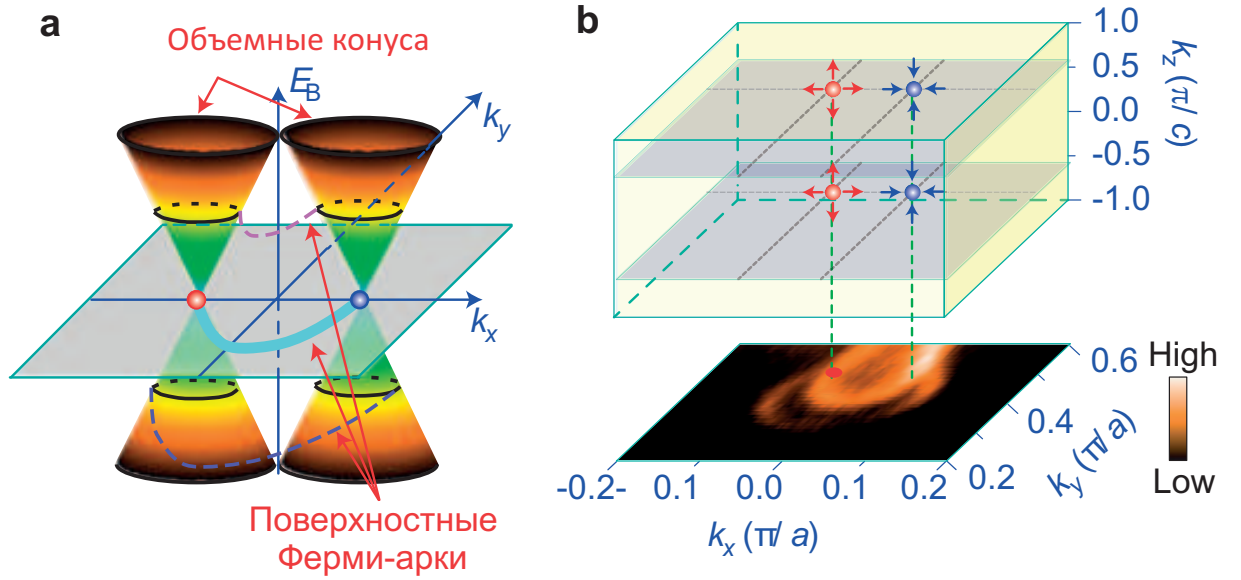


Рис. 2. а) Спектр объемных и поверхностных состояний в вейлевском полуметалле. б) Представление вейлевских точек как псевдо-магнитных монополей в k -пространстве. Стрелками показано направление псевдо-магнитного поля, которое определяется знаком кирального заряда. Проекции вейлевских точек с противоположными киральными зарядами на поверхностную зону Бриллюэна должны быть связаны ферми-аркой. Из работы [8].

а из симметрии по отношению к обращению времени

$$H(\mathbf{p}) = H^*(-\mathbf{p}). \quad (5)$$

Значит

$$H(\mathbf{p}) = \sigma_x H^*(\mathbf{p}) \sigma_x, \quad (6)$$

а это запрещает член, пропорциональный σ_z , в гамильтониане. Однако если одна из этих симметрий нарушена, то возникает член с σ_z и открывается щель в спектре. Подобная ситуация может реализовываться под действием волны зарядовой плотности или в случае, когда графен лежит на подложке из нитрида бора, что делает его подрешетки неэквивалентными. В то же время гамильтониан вейлевского полуметалла содержит все три матрицы Паули и, таким образом, вырождение, связанное с вейлевской точкой, не может быть снято возмущением, пропорциональным σ_z .

Более строго топологическая защищенность вейлевских точек может быть

показана с помощью введения, так называемого, кирального заряда [75]. Вейлевские точки являются топологическими объектами и представляют собой псевдо-магнитные монополи в k -пространстве, см. Рис. 2b. Можно ввести эффективный вектор-потенциал (фазу Берри) и псевдо-магнитное поле (кривизну Берри) согласно

$$\mathbf{A}(\mathbf{k}) = -i \sum_n \langle u_{n,\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} | u_{n,\mathbf{k}} \rangle, \quad (7)$$

$$\mathbf{B}(\mathbf{k}) = \nabla_{\mathbf{k}} \times \mathbf{A}(\mathbf{k}), \quad (8)$$

где суммирование ведется по занятым зонам. Киральный заряд определяется как

$$n = \frac{1}{2\pi} \int_S \mathbf{B}(\mathbf{k}) d\mathbf{S}_{\mathbf{k}}, \quad (9)$$

где S —некоторая поверхность в k -пространстве, содержащая вейлевскую точку. Если взять поверхность S достаточно маленькой, так, чтобы на ней еще был справедлив гамильтониан (2.1), то прямой расчет дает $n = \pm 1$, где знак соответствует знаку в гамильтониане (2.1) (киральности). Тогда, согласно теореме Гаусса, $n = \pm 1$ для любой поверхности, содержащей вейлевскую точку. Таким образом, вейлевская точка представляет собой дельта-функциональную особенность в k -пространстве и однозначно характеризуется киральным зарядом. Если теперь рассчитать поток эффективного магнитного поля через всю зону Бриллюэна, то он должен быть нулевым. Это значит, что вейлевские точки всегда появляются и аннигилируют парами с противоположными киральными зарядами и отдельная точка вырождения не может просто исчезнуть. Это и означает топологическую защищенность.

Если вейлевская точка появится в некоторой точке k зоны Бриллюэна, то из T -симметрии следует, что в $-k$ должна появиться вейлевская точка с таким же киральным зарядом. Однако полный киральный заряд всей зоны Бриллюэна должен быть равен нулю. Это значит, что еще две вейлевские точки с противоположным киральным зарядом должны возникнуть в k' и $-k'$. Из I -симметрии следует, что киральный заряд точек k и $-k$ должен быть противоположным.

Значит, если в системе присутствуют как \hat{T} -симметрия, так и \hat{I} -симметрия, то $k = k'$ и в этой точке спектр четырехкратно вырожден. Такие материалы называются дираковскими. Чтобы частично снять вырождение до двухкратного и получить вейлевский полуметалл, нужно нарушить одну из симметрий. Таким образом, фаза вейлевского полуметалла может реализовываться в материалах, где отсутствует \hat{T} или \hat{I} -симметрия [69].

2.2. Поверхностные состояния

Помимо интересных объемных свойств, вейлевские полуметаллы демонстрируют поверхностные состояния довольно экзотического вида, так называемые "ферми-арки". Как известно, для любой чисто двумерной электронной системы ферми-поверхности должны быть замкнутыми. Однако для поверхностных состояний в вейлевском полуметалле это не так. Их ферми-контур на каждой поверхности представляют собой незамкнутые кривые, соединяющие проекции объемных вейлевских точек с противоположными киральными зарядами на поверхностную зону Бриллюэна, Рис. 2b. В пластине же ферми-контур от верхней и нижней поверхностей дополняют друг друга, снова образуя замкнутую кривую.

Кроме того, что такие поверхностные состояния с незамкнутыми ферми-контурами интересны сами по себе, они приводят, например, к необычным текстурам спиновой поляризации [76] и новым эффектам квантовой интерференции в туннельной спектроскопии [77]. Довольно своеобразны также траектории движения электронов, заполняющих поверхностные состояния в пластине, во внешнем магнитном поле, перпендикулярном ее поверхности [78], см. Рис. 3. Поскольку в магнитном поле энергия электрона сохраняется, то он должен двигаться вдоль изоэнергетических поверхностей. Рассмотрим электрон, который занимает поверхностное состояние на нижней поверхности пластины. Тогда под действием магнитного поля в импульсном пространстве он будет двигаться вдоль соответствующей ферми-арки пока не достигнет вейлевской точки. В

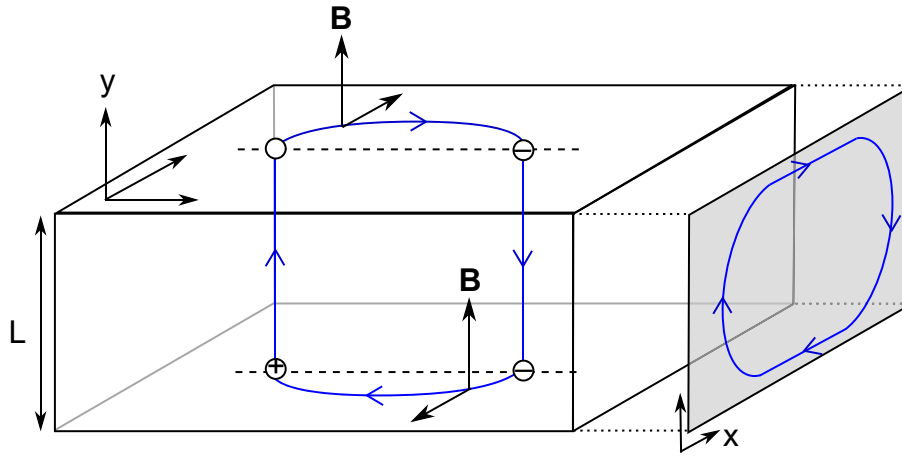


Рис. 3. Траектории электрона в реальном и импульсном пространствах в пластине из вейлевского полуметалла, помещенной во внешнее магнитное поле перпендикулярное ее поверхности. Из работы [78].

этот момент электрон будет вынужден перейти на верхнюю поверхность пластины, двигаясь уже в реальном пространстве. На верхней поверхности пластины он сможет замкнуть свою траекторию в импульсном пространстве, перемещаясь вдоль соответствующей ферми-арки. Таким образом, несмотря на открытые ферми-контура, траектория электрона в импульсном пространстве остается замкнутой и осцилляции плотности состояний с периодом пропорциональным $1/B$, характерные для обычных металлов, имеют место [78].

Существование ферми-арок гарантируется нетривиальной топологией зонной структуры вейлевского полуметалла [68]. Построим замкнутую кривую на поверхностной зоне Бриллюэна. Пусть обход по этой кривой осуществляется при изменении параметра $\lambda: 0 \rightarrow 2\pi$, тогда $\mathbf{k}_\lambda = (k_x(\lambda), k_y(\lambda))$. Рассмотрим гамильтониан $H(\mathbf{k}_\lambda, k_z) = H(\lambda, k_z)$, который может быть интерпретирован как гамильтониан 2D системы с импульсом (λ, k_z) и зоной Бриллюэна в виде тора (т. к. λ и k_z —периодические функции). Число Черна такой 2D зонной структуры равно суммарному киральному заряду вейлевских точек, попадающий в тор. Если построенная кривая охватывает проекцию одной вейлевской точки, то число Черна равно единице. Пусть теперь у системы есть граница при $z = 0$, тогда должно существовать киральное краевое состояние, которое пересекает уровень

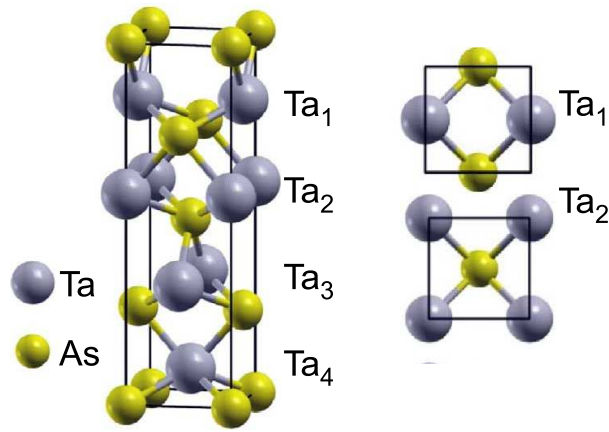


Рис. 4. Объемноцентрированная тетрагональная решетка TaAs. Из работы [79]

Ферми при некотором $\mathbf{k}_{\lambda 0}$. Так как это верно для любой кривой, охватывающей только одну вейлевскую точку, то получается линия. Если же кривая охватывает две вейлевские точки с противоположными киральными зарядами или ни одной точки, то число Черна равно нулю и такого краевого состояния нет. Таким образом, ферми-контур поверхностных состояний должен начинаться в вейлевской точке с одной киральностью и заканчиваться в точке с противоположной, т. е. представлять собой ферми-арку.

Наличие вейлевских точек и ферми-арок позволяет рассматривать вейлевский полуметалл как промежуточную фазу между тривиальными и топологическими изоляторами [67, 79].

2.3. Вейлевский полуметалл арсенид тантала

Теоретически [79] и экспериментально [7–9] подтверждено, что арсенид тантала (TaAs) является вейлевским полуметаллом. У этого материала объемноцентрированная тетрагональная элементарная ячейка, см. Рис. (4). Кристаллическая структура состоит из подрешеток тантала и мышьяка так, что в каждой элементарной ячейке по одному атому каждого сорта. Постоянные решетки $a = 3.437 \text{ \AA}$, $c = 11.656 \text{ \AA}$. У системы нет горизонтальной плоскости отражения и, следовательно, симметрии по отношению к пространственной инверсии.

Зонная структура TaAs в пластине изучалась с применением численных

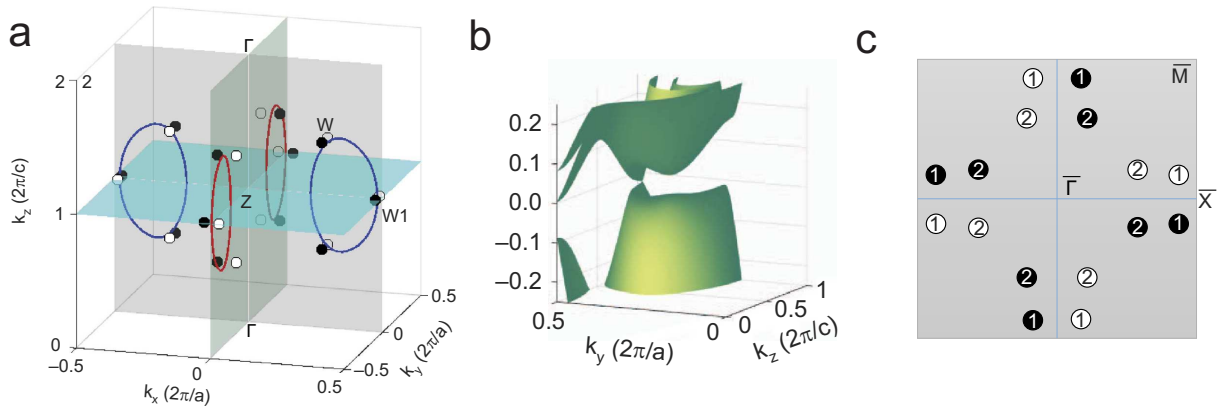


Рис. 5. Вейлевский полуметалл TaAs: результаты численного расчета из первых принципов из работы [79]. а) Объемная зона Бриллюэна. Черными и белыми кружками показаны вейлевские точки с учетом знака кирального заряда. б) Зонная структура вблизи одной из вейлевских точек. в) Схема проектирования объемных вейлевских точек с учетом кирального заряда на поверхностную зону Бриллюэна.

расчетов из первых принципов [79]. Кратко опишем основные результаты. В зоне Бриллюэна TaAs всего 24 вейлевские точки (см. Рис. 5а). Вблизи каждой точки спектр объемных состояний конический (см. Рис. 5б). Вейлевские точки можно условно разделить на две группы: W_1 и W_2 . Вейлевские точки W_1 расположены в плоскости $k_z = 2\pi/c$ и их всего 8. Остальные 16 точек W_2 лежат вне этой плоскости. Такое разделение вейлевских точек связано с тем, как они проецируются на поверхностную зону Бриллюэна: точки W_2 проецируются парами, в то время как W_1 – по одной (см. Рис. 5с). Также в работе [79] были рассчитаны киральные заряды Вейлевских точек. На Рис. 5с вейлевские точки с положительными киральными зарядами отмечены белым, а с отрицательными – черным.

Поверхностные состояния в TaAs должны возникать на поверхности (001). Расчет ферми-контуров этих состояний на верхней поверхности пластины из TaAs представлен на Рис. 6а, а на нижней – на Рис. 6б. На этих рисунках четко видны ферми-арки, связывающие проекции объемных вейлевских точек с противоположными киральными зарядами. Схематически ферми-контур на соответствующих поверхностях изображены на Рис. 6с и 6д. Точки типа W_1

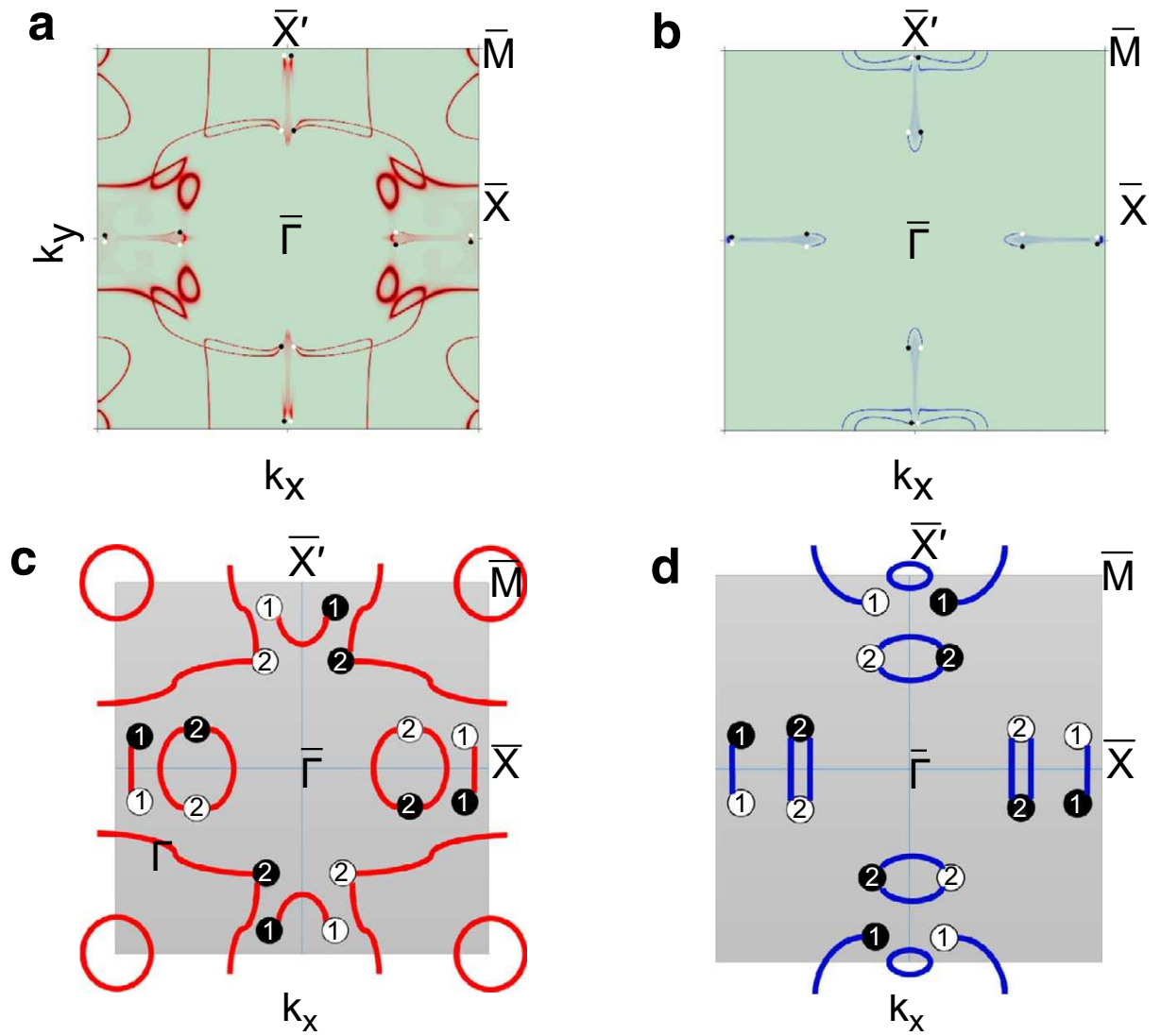


Рис. 6. Результаты численного расчета из первых принципов ферми-контуров (001) поверхностных состояний на верхней (a) и нижней (b) сторонах пластины из TaAs [79]. Панели c и d показывают схематическое соединение ферми-контуров на соответствующих поверхностях.

связываются одной аркой, в то время как W_2 – двумя. Это связано с тем, что в каждую точку типа W_2 на поверхностной зоне Бриллюэна проектируется две объемные точки с одинаковыми киральными зарядами, см. Рис. 5с, а каждую пару точек с разными зарядами должна связывать арка. Важно отметить, что поверхностные состояния на верхней и нижней поверхностях существенно различны, что связано с отсутствием центра инверсии в системе.

Как вейлевские конусы в объеме TaAs, так и ферми-арки на поверхности наблюдались экспериментально сразу несколькими группами с помощью рентге-

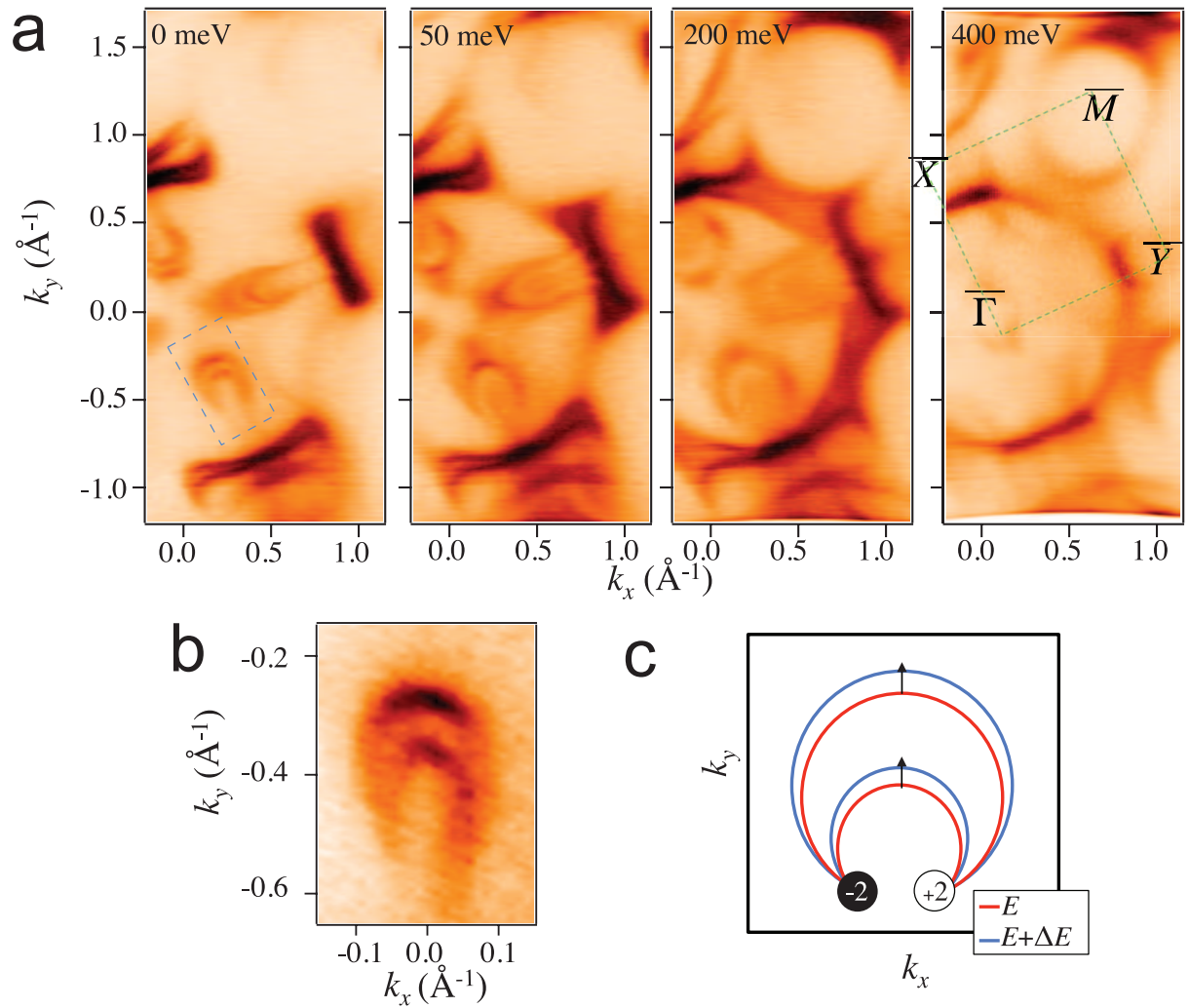


Рис. 7. а) Ферми-контура поверхностных состояний на (001) поверхности TaAs при различных энергиях измеренные с помощью рентгеновской фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением. б) Увеличенное изображение ферми-арки, выделенной на панели а синим прямоугольником. в) Схематическое изображение эволюции ферми-арки при изменении энергии. Из работы [7]

новской фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением [7–9]. Результаты измерений ферми-контуров из работы [7] представлены на Рис. 7.

3. Краевые состояния в графене

3.1. Описание края графена

Обычно рассматриваются два типа края графена "зигзаг" и "кресло" [80–82]. В приближении ближайших соседей модели сильной связи на краю типа "зигзаг" существуют бездисперсионные краевые состояния (КС), а на краю типа "кресло" КС нет. Однако экспериментально контролировать ориентацию края очень сложно, и даже если край макроскопически плавный и ориентированный, он необязательно микроскопически упорядочен [83]. Несмотря на это, КС были обнаружены около одноатомных ступеней на поверхности графита [84], на интерфейса графен-нитрид бора [85] и, наконец, в графеновых структурах [86, 87]. Более детальные исследования показывают, что КС на краю "зигзаг" могут обладать дисперсией [88], зависят от химического окружения [89] и что КС могут существовать даже на краю типа "кресло" [90].

Рассмотрим описание края графена в рамках непрерывной двухзонной дираковской модели. В этой модели электроны в каждой долине графена описываются уравнением Вейля-Дирака

$$v\sigma\mathbf{p}\psi = E\psi, \quad (10)$$

где v – скорость Ферми, $\psi = (\psi_1, \psi_2)^T$ – двухкомпонентная волновая функция.

Чтобы описать край, уравнение (10) должно быть дополнено ГУ. Обычно используется ГУ типа зигзаг $\psi_2 = 0$ (или $\psi_1 = 0$) [81, 82, 91] или ГУ Берри-Мондрагона [92–94]. Однако реальный край графена может быть реконструирован, релаксирован, беспорядочен и неоднороден, вблизи него может происходить загиб зон [95], на краю также могут присутствовать оборванные связи и примеси [96]. Чтобы описать такой край, мы рассмотрим общее ГУ. В рамках модели Дирака такое ГУ обсуждалось в работах [97–100] и в однодолинном приближении оно имеет вид [88, 101]

$$(\psi_1 + ia e^{-i\varphi} \psi_2) \Big|_{at\ edge} = 0. \quad (11)$$

Здесь φ – угол между осью x и нормалью к краю, a – феноменологический граничный параметр, характеризующий структуру края. ГУ для другой долины может быть получено из условия симметрии по отношению к инверсии времени.

ГУ описывает общий вид края без конкретизации его микроскопической структуры, поскольку следует из общезначимого требования зануления нормальной к краю компоненты тока, а также дополнительного предположения об отсутствии междолинного взаимодействия на краю.

Другой способ описания края графена состоит в том, чтобы добавить к уравнению Вейля-Дирака (10) эффективный потенциал $V(\mathbf{r})$, который является комбинацией электростатического и подрешеточного потенциалов

$$V(\mathbf{r}) = \frac{m(\mathbf{r})}{2}[(1 - a^2)\sigma_0 + (1 + a^2)\sigma_z], \quad (12)$$

где $m(\mathbf{r}) = 0$ внутри графена. Если "масса" $m(\mathbf{r})$ вне графена существенно больше характерных энергий в графене (ширины зоны проводимости и ширины валентной зоны), т.е. $m(\mathbf{r}) \rightarrow \infty$, тогда волновая функция почти не проникает наружу и условия сшивки для волновой функции на границе приводят к ГУ (11). Знак параметра a определяется знаком массы $m(\mathbf{r})$ вне графена. ГУ в приближении бесконечной массы, которой аналогично ГУ (11) с $a = 1$ было получено в работе [92] с помощью аналогичной процедуры с $V(\mathbf{r})$, содержащим только подрешеточный потенциал. Стоит отметить, что переформулировка ГУ в терминах эффективного потенциала $V(\mathbf{r})$ учитывает только две зоны, в то время как другие зоны могут существенно влиять на ГУ.

Величина параметра a может быть найдена из сравнения с экспериментом [95, 102] или из более детальных расчетов [88]. Для любых значений параметра a , эффективный потенциал $V(\mathbf{r})$ обязательно содержит подрешеточный потенциал. На скалярном потенциале в графене не могут возникнуть связанные состояния, кроме состояний с нулевой энергией или квазистационарных состояний около сверхкритической заряженной примеси [91]. Только комбинация электростатического и подрешеточного потенциалов позволяет описать связанные со-

стояния.

Края графена можно разделить на две группы: поддерживающие КС (параметр a меняется плавно и $|a| \neq 1$) и не поддерживающие (параметр a меняется сильно или $|a| = 1$). Мы будем рассматривать края первого типа с плавно меняющимся вдоль края или постоянным параметром $|a| \neq 1$.

3.2. Краевые состояния на линейном краю

Чтобы найти спектр КС на линейном краю графена в рамках непрерывного описания, необходимо решить уравнение Вейля-Дирака (10) на полупространстве $x \geq 0$, дополненное ГУ (11) с постоянным граничным параметром a [88, 101]. Импульс вдоль границы $\hbar k_y$, отсчитанный от проекций центров долин ($\pm \hbar K_{0y}$) на край, является хорошим квантовым числом. Объемные волновые функции представляют собой сумму падающей и отраженной плоских волн. Объемный спектр находится в диапазоне энергий $|E| \geq v\hbar|k_y|$, в то время как спектр КС лежит вне этого диапазона. Спектр КС на плоскости $E(k_y)$ представляет собой лучи, исходящие из точек $\pm \hbar K_{0y}$ и описывается дисперсионным уравнением

$$E_s = s\hbar v \frac{2a}{1+a^2} k_y, \quad s k_y (1-a^2) > 0, \quad (13)$$

где $s = \pm 1$ – индекс долины. Волновая функция КС экспоненциально затухает при удалении от края $\psi(x) \propto e^{-sx(1-a^2)k_y/(1+a^2)}$.

Следует отметить, что КС "киральны" т.е. не симметричны относительно центра долины, но симметричны относительно центра краевой зоны Бриллюэна в соответствии с симметрией по отношению к обращению времени.

Учет междолинного взаимодействия приводит к качественно таким же результатам. Кроме того, для широкого класса трансляционно-инвариантных краев, например, для края типа зигзаг, расстояние между проекциями центров долин $2|K_{0y}|$ велико по сравнению с импульсом электрона, поэтому краевое междо-

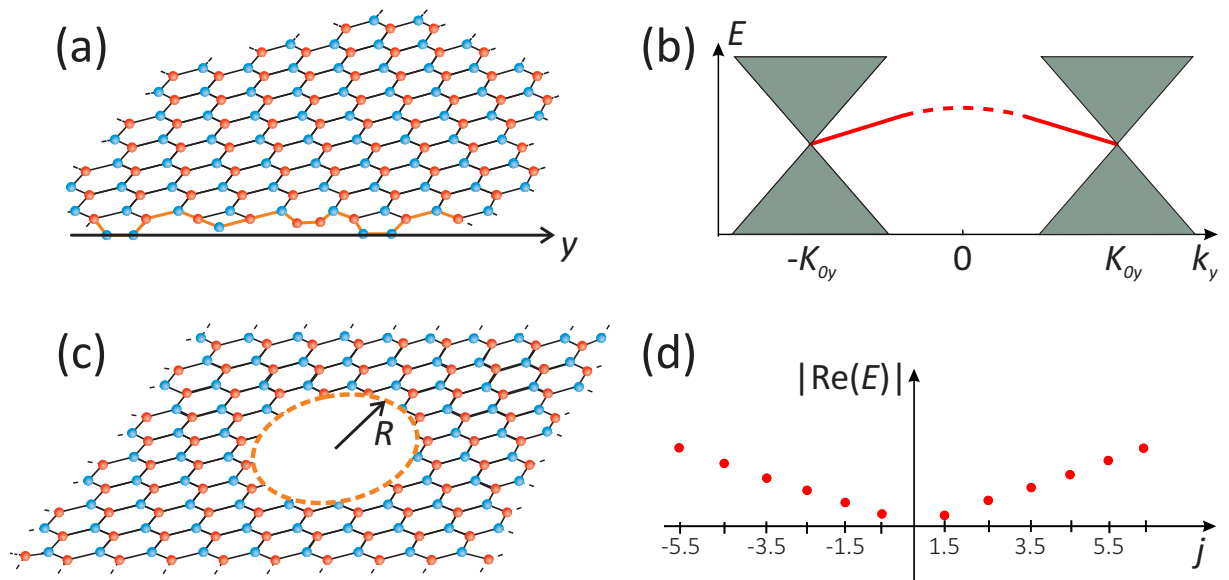


Рис. 8. а) Полу плоскость графена. б) Энергетический спектр $E(k_y)$ полу плоскости графена. Здесь k_y – это волновой вектор вдоль края, отсчитываемый от центра краевой зоны Бриллюэна. Закрашенная область отвечает объемным состояниям, а лучи, исходящие из центров долин – краевым. В пренебрежении междолинным взаимодействием лучи бесконечны, а учет взаимодействия приводит к смыканию лучей вблизи центра зоны Бриллюэна. в) Антиточка в графене. г) Энергетический спектр квазистационарных краевых состояний, локализованных на антиточке (показана действительная часть энергии). Знак полного углового момента j связан с долинным индексом.

линное взаимодействие пренебрежимо мало [88]. Для больших энергий электрона краевое междолинное взаимодействие важно и приводит к смыканию лучей от краевых состояний из разных долин, см. Рис. 8b.

3.3. Квазистационарные краевые состояния, локализованные на антиточке в графене

Графен с круглыми наноотверстиями, которые часто называют антиточками, может быть использован в микроэлектронике [103–107], как метаматериал в терагерцовой электронике [108], а также для изучения квантовых эффектов как, например, эффект Ааронова-Бома [109, 110]. Даже примеси в графене можно рассматривать как антиточки с очень маленьким радиусом [82, 91, 99].

На антиоточке в графене существуют краевые состояния [102]. Чтобы определить их спектр, следуя работе [13], рассмотрим круглое наноотверстие, которое схематически изображено на Рис. 8с. Полный угловой момент $j = l + 1/2 = \pm 1/2, \pm 3/2 \dots$ сохраняется (l -орбитальный угловой момент), поэтому, в полярной системе координат (r, φ) волновая функция имеет вид $\psi \propto \exp(ij\varphi)$. Для определенности, будем рассматривать отрицательные энергии $E < 0$. Каждая компонента волновой функции подчиняется уравнению Бесселя

$$r^2 \psi_1''(r) + r \psi_1'(r) + [(kr)^2 - l^2] \psi_1 = 0, \quad (14)$$

где $k = -E/(\hbar v)$ – волновой вектор.

Решения, соответствующие объемным состояниям, представляют собой функции Бесселя и их комбинации. На таком наноотверстии нет локализованных стационарных КС, однако могут существовать квазистационарные. Рассмотрим комплексные энергии $E = E' + iE''$, полагая $E'' \ll E'$ и $E'' > 0$. Мнимая часть энергии E'' определяет время жизни квазистационарного состояния с энергией E' . Поскольку волновая функция квазистационарного состояния является уходящей волной, ее можно выбрать в виде

$$\begin{pmatrix} \psi_1(r, \varphi) \\ \psi_2(r, \varphi) \end{pmatrix} = C \begin{pmatrix} e^{il\varphi} H_l^{(2)}(kr) \\ -ie^{i(l+1)\varphi} H_{l+1}^{(2)}(kr) \end{pmatrix}, \quad (15)$$

где $H_l^{(2)}(x)$ – функция Ганкеля второго рода, C – нормировочный множитель. Для положительных энергий $E' > 0$ нужно брать функции Ганкеля первого рода. Подставляя волновую функцию (15) в ГУ (11), мы получим дисперсионное уравнение

$$H_l^{(2)}(kR) = -a H_{l+1}^{(2)}(kR). \quad (16)$$

Разлагая функции Ганкеля в ряд Лорана вблизи $kR = 0$, для $l \neq 0$ можно получить низкоэнергетический спектр ($|la| \ll 1/2$) квазистационарных КС:

$$kR \approx -2sla + i \frac{2\pi|a|(|la|)^{2l}}{[(l-1)!]^2}, \quad sla < 0. \quad (17)$$

Это уравнение описывает электронный спектр для обеих долин. Спектр в каждой долине эквидистантен. КС киральны, т. е. знак полного углового момента КС j зависит от индекса долины s : он положителен в одной долине и отрицателен в другой. При малых значениях параметра a , действительная часть спектра может быть получена квазиклассически из (13) с помощью замены k_y на l/R .

Энергия "основного" состояния с $l = 0$ определяется трансцендентным уравнением

$$|a| = kR \ln \frac{kR}{2}. \quad (18)$$

Основное состояние имеет большое время жизни только для $kR \ll 0.1$, в противном случае E'' близко к E' . Спектр краевых состояний в обеих долинах показан на Рис. 8d.

Существование квазистационарных КС на антиточке приводит к резонансной зависимости проводимости перфорированных графеновых структур от положения уровня Ферми [13], а также к резонансам в коэффициенте поглощения на частотах, соответствующих расстоянию между уровнями КС [111].

Интерфейсное спин-орбитальное взаимодействие в квантовых ямах на основе соединений A_3B_5

В этой главе исследуется влияние интерфейсного спин-орбитального взаимодействия (ИСОВ) на спиновое расщепление спектра двумерных (2D) электронов в зоне проводимости гетероструктур на основе соединений A_3B_5 . В разделе (1.1) выведено феноменологическое граничное условия (ГУ) для огибающих функций (ОФ) электрона проводимости на гетероинтерфейсе типа (001) GaAs/AlGaAs, которое учитывают вклады от ИСОВ общего вида. Использованы требование эрмитовости эффективного многозонного kr гамильтониана на полупространстве, инвариантность задачи по отношению к обращению времени и симметрия интерфейса C_{2v} . В разделе (1.2) развита теория спинового расщепления спектра 2D электронов на гетеропереходе в отсутствие магнитного поля. Используется обобщение трехмерного (3D) метода эффективной массы на случай высокого гетеробарьера. Атомарно резкий интерфейс описывается выведенным ГУ, отличие которого от нулевых считается малым параметром теории. В нижнем порядке по этому параметру и величине спин-орбитального взаимодействия (СОВ) получен перенормированный 3D гамильтониан для ОФ, удовлетворяющих нулевым ГУ. Последующее усреднение этого гамильтониана по движению вдоль нормали к интерфейсу приводит к искомому спиновому 2D гамильтониану, содержащему перенормированные за счет ИСОВ параметры α_{BIA} и α_{SIA} . В этом же разделе рассмотрена узкая квантовая яма (КЯ), в которой энергия размерного квантования существенно превосходит энергию взаимодействия с электрическим полем и необходимо учитывать ИСОВ на двух гетероинтерфейсах. В разделе (1.3) исследовано зеемановское расщепление электронных уровней Ландау в несимметричных гетероструктурах и получены выражения для компонент тензора g с учетом интерфейсных перенормировок. В

разделе (1.4) проведено сравнение полученных результатов для g -фактора с экспериментальными данными по ЭПР в сравнительно широких КЯ GaAs/AlGaAs с большим встроенным электрическим полем. Извлечены интерфейсные параметры, вычислены величины интерфейсных перенормировок констант Рашбы и Дрессельхауза и показано, что они не являются малыми.

1.1. Граничное условие для огибающих функций электрона проводимости на гетероинтерфейсе

Рассмотрим гетеропереход на основе соединений A_3B_5 , например, (001) GaAs / $Al_xGa_{1-x}As$. Оси x , y , z направлены вдоль кристаллографических направлений [100], [010], [001], соответственно. Внешняя нормаль к границе направлена вдоль оси z . Электроны занимают область $z \leq 0$ и движутся в потенциальной яме, которая создается плавным (на атомарных масштабах) потенциалом $V(z)$ при $z < 0$ и атомарно-резким непроницаемым барьером при $z = 0$. Из общих требований эрмитовости гамильтониана на полупространстве, инвариантности задачи относительно обращения времени и дополнительных симметричных соображений получим ГУ для ОФ зоны проводимости Γ_{6c} при $z = 0$.

Динамика электрона проводимости при $z < 0$ описывается в рамках многозонного метода ОФ уравнением Кона-Латтинжера [49]

$$\left[(E_n(0) + V(z)) \delta_{nn'} + \frac{\hat{\mathbf{p}}\mathbf{p}_{nn'}}{m_0} + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} (\mathbf{p}[\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V_0])_{nn'} \right] \Phi_{n'} = E\Phi_n, \quad (1.1)$$

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

Гамильтониан задачи (1.1) должен быть самосопряженным оператором, поскольку его собственные значения E действительны. Условие самосопряжен-

ности оператора состоит в том, что требование его эрмитовости $\langle \Phi_\lambda | \hat{H} | \Phi_\nu \rangle = \langle \Phi_\nu | \hat{H} | \Phi_\lambda \rangle^*$ выполнено для всех функций из его области определения.

Для гамильтониана задачи (1.1), который определен на правом полупространстве, имеем

$$\langle \Phi_\lambda | \hat{H} | \Phi_\nu \rangle = \langle \Phi_\nu | \hat{H} | \Phi_\lambda \rangle^* + \int dx dy (\Phi_\lambda^\dagger \hat{\mathbf{v}}_z \Phi_\nu)|_{z=0}, \quad (1.2)$$

где $\hat{\mathbf{v}}_z$ – недиагональная матрица скорости $(\mathbf{v}_z)_{nn'} = \partial_{p_z}(H_{nn'})$.

Из условия самосопряженности задачи следует, что область определения гамильтониана нужно ограничить ОФ, для которых выполнено условие

$$\int dx dy (\Phi_\lambda^\dagger \hat{\mathbf{v}}_z \Phi_\nu)|_{z=0} = 0. \quad (1.3)$$

В случае трансляционно-инвариантной поверхности, ОФ имеют вид

$\Phi_\lambda = \Phi_\lambda(z) |p_x, p_y\rangle$, $\Phi_\nu = \Phi_\nu(z) |p'_x, p'_y\rangle$, где $|p_x, p_y\rangle$ – двумерная плоская волна.

Тогда условие (1.3) записывается как

$$\delta_{p_x p'_x} \delta_{p_y p'_y} (\Phi_\lambda^\dagger(z) \hat{\mathbf{v}}_z \Phi_\nu(z))|_{z=0} = 0. \quad (1.4)$$

Для огибающих функций, соответствующих разным импульсам условие (1.4) выполняется автоматически. При совпадающих импульсах для зависящих от координаты z компонент ОФ получим условие, которое эквивалентно занулению на границе нормальной компоненты оператора тока

$$(\Phi_\lambda^\dagger(z) \hat{\mathbf{v}}_z \Phi_\nu(z))|_{z=0} = 0. \quad (1.5)$$

Далее будем рассматривать второй случай.

Для описания зонной структуры соединений типа A_3B_5 с не очень широкой запрещенной зоной обычно используют модель Кейна [33, 49]. В этой модели учитываются 4 зоны (с учетом спина 8 зон): зона проводимости, зоны тяжелых и легких дырок, спин-орбитально отщепленная зона. Однако эта модель не учитывает отсутствия центра инверсии в кристаллическом потенциале. Воспользуемся

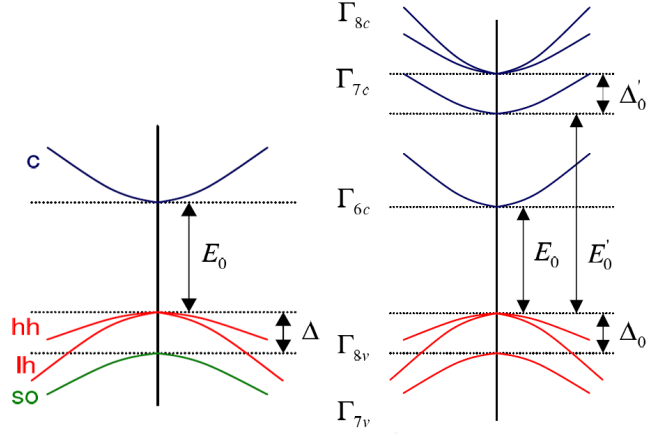


Рис. 1.1. Структура зон соединений типа A_3B_5 в стандартной и расширенной моделях Кейна [49].

поэтому 14-зонной расширенной моделью Кейна. Теперь, кроме зон симметрии Γ_{6c} , Γ_{8v} и Γ_{7v} , включенных в стандартную модель Кейна, также учитываются более высокие зоны Γ_{8c} и Γ_{7c} [33, 49]. Гамильтониан (1.1) становится матрицей 14×14 . При этом не зануляются три матричных элемента оператора импульса: P_0 (между функциями зон Γ_{6c} и Γ_{7v} , Γ_{8v}), P_1 (между функциями зон Γ_{6c} и Γ_{7c} , Γ_{8c}) и Q (между функциями зон Γ_{7v} , Γ_{8v} и Γ_{7c} , Γ_{8c}). Отличие P_1 от нуля обусловлено отсутствием центра инверсии в кристалле A_3B_5 . Также не зануляется матричный элемент Δ^- , связанный со спин-орбитальным взаимодействием между зонами Γ_{7v} , Γ_{8v} и Γ_{7c} , Γ_{8c} :

$$P_0 = \frac{\hbar}{m_0} \langle S | p_x | X \rangle = \frac{\hbar}{m_0} \langle S | p_y | Y \rangle = \frac{\hbar}{m_0} \langle S | p_z | Z \rangle, \quad (1.6)$$

$$P_1 = \frac{i\hbar}{m_0} \langle X' | p_x | S \rangle = \frac{i\hbar}{m_0} \langle Y' | p_y | S \rangle = \frac{i\hbar}{m_0} \langle Z' | p_z | S \rangle, \quad (1.7)$$

$$Q = \frac{\hbar}{m_0} \langle X | p_y | Z' \rangle = -\frac{\hbar}{m_0} \langle X' | p_y | Z \rangle, \quad (1.8)$$

$$\Delta^- = \frac{3\hbar}{m_0^2 c^2} \langle X | [\nabla V_0 \times p]_y | Z' \rangle = -\frac{3\hbar}{m_0^2 c^2} \langle Z | [\nabla V_0 \times p]_y | X' \rangle. \quad (1.9)$$

Задача принимает вид

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

Band	$ m\rangle$	Basis functions	Energy
Γ_{6c}	$ \frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle$	$ S \uparrow\rangle$	0
	$ \frac{1}{2} -\frac{1}{2}\rangle$	$ S \downarrow\rangle$	0
Γ_{8v}	$ \frac{3}{2} \frac{3}{2}\rangle$	$-\frac{1}{\sqrt{2}} (X+iY) \uparrow\rangle$	$-E_0$
	$ \frac{3}{2} \frac{1}{2}\rangle$	$\sqrt{\frac{2}{3}} Z \uparrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{6}} (X+iY) \downarrow\rangle$	$-E_0$
	$ \frac{3}{2} -\frac{1}{2}\rangle$	$\sqrt{\frac{2}{3}} Z \downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} (X-iY) \uparrow\rangle$	$-E_0$
Γ_{7v}	$ \frac{3}{2} -\frac{3}{2}\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{2}} (X-iY) \downarrow\rangle$	$-E_0$
	$ \frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle$	$-\frac{1}{\sqrt{3}} Z \uparrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} (X+iY) \downarrow\rangle$	$-(E_0 + \Delta_0)$
	$ \frac{1}{2} -\frac{1}{2}\rangle$	$\frac{1}{\sqrt{3}} Z \downarrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} (X-iY) \uparrow\rangle$	$-(E_0 + \Delta_0)$
Γ_{8c}	$ \frac{3}{2} \frac{3}{2}\rangle'$	$-\frac{1}{\sqrt{2}} (X'+iY') \uparrow\rangle$	$E'_0 - E_0 + \Delta_0$
	$ \frac{3}{2} \frac{1}{2}\rangle'$	$\sqrt{\frac{2}{3}} Z' \uparrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{6}} (X'+iY') \downarrow\rangle$	$E'_0 - E_0 + \Delta_0$
	$ \frac{3}{2} -\frac{1}{2}\rangle'$	$\sqrt{\frac{2}{3}} Z' \downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{6}} (X'-iY') \uparrow\rangle$	$E'_0 - E_0 + \Delta_0$
Γ_{7c}	$ \frac{3}{2} -\frac{3}{2}\rangle'$	$\frac{1}{\sqrt{2}} (X'-iY') \downarrow\rangle$	$E'_0 - E_0 + \Delta_0$
	$ \frac{1}{2} \frac{1}{2}\rangle'$	$-\frac{1}{\sqrt{3}} Z' \uparrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} (X'+iY') \downarrow\rangle$	$E'_0 - E_0$
	$ \frac{1}{2} -\frac{1}{2}\rangle'$	$\frac{1}{\sqrt{3}} Z' \downarrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} (X'-iY') \uparrow\rangle$	$E'_0 - E_0$

Рис. 1.2. Базисные функции расширенной модели Кейна [49].

с общим ограничением (1.5). Так как в многокомпонентной функции $\Phi(z)$ велик лишь спинор, отвечающий зоне проводимости Γ_{6c} , сделаем унитарное преобразование $\Phi(z) = e^S \phi(z)$ (с учетом kp -членов до третьего порядка включительно), сводящее гамильтониан к однозонному с эффективной массой m^* [33].

Теперь 3D гамильтониан зоны проводимости содержит вклады \hat{H}_{BIA} и \hat{H}_{SIA} , описывающие спиновое расщепление за счет отсутствия центра инверсии в кристалле и асимметрии ямы:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m^*} + V(z) + \hat{H}_{BIA} + \hat{H}_{SIA}, \quad (1.10)$$

$$\hat{H}_{BIA} = \frac{\gamma_c}{\hbar^3} \left[\sigma_x p_x (p_y^2 - \hat{p}_z^2) + \sigma_y p_y (\hat{p}_z^2 - p_x^2) + \sigma_z \hat{p}_z (p_x^2 - p_y^2) \right], \quad (1.11)$$

$$\hat{H}_{SIA} = a_{SO} (\sigma_x p_y - \sigma_y p_x) \partial_z V(z), \quad (1.12)$$

где

$$\frac{1}{m^*} = \frac{2P_0^2}{3\hbar^2} \left[\frac{2}{E_0} + \frac{1}{E_0 + \Delta_0} \right] - \frac{2P_1^2}{3\hbar^2} \left[\frac{1}{E_1 - E_0} + \frac{2}{E_1 - E_0 + \Delta_1} \right] - \frac{8P_0 P_1 \Delta^-}{9\hbar^2} \left[-\frac{1}{(E_1 - E_0)(E_0 + \Delta_0)} + \frac{1}{E_0(E_1 - E_0 + \Delta_1)} \right], \quad (1.13)$$

$$\gamma_c = \frac{4P_0 P_1 Q}{3} \left[\frac{1}{(E_1 - E_0)E_0} - \frac{1}{(E_0 + \Delta_0)(E_1 - E_0 + \Delta_1)} \right], \quad (1.14)$$

$$a_{SO} = \frac{P_0^2}{3\hbar} \left[\frac{1}{E_0^2} - \frac{1}{(E_0 + \Delta_0)^2} \right]. \quad (1.15)$$

Условие (1.5) тем же преобразованием сводится к ограничению для спинора $\phi = (\phi_1, \phi_2)^t$:

$$\left(\phi_\lambda^\dagger \tilde{v}_z \phi_\nu + (\tilde{v}_z \phi_\lambda)^\dagger \phi_\nu \right) \Big|_{z=0} = 0, \quad (1.16)$$

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

где

$$\begin{aligned} \frac{\chi}{2m^*} = & \frac{P_0^2}{3\hbar^2} \left(\frac{1}{E_0} - \frac{1}{E_0 + \Delta_0} \right) - \frac{P_1^2}{3\hbar^2} \left(\frac{1}{E_1 - E_0} + \frac{1}{E_1 - E_0 + \Delta_1} \right) - \\ & - \frac{2P_0 P_1 \Delta^-}{9\hbar^2} \left(-\frac{2}{(E_1 - E_0)(E_0 + \Delta_0)} - \frac{1}{E_0(E_1 - E_0 + \Delta_1)} \right), \end{aligned} \quad (1.17)$$

$$\frac{b}{2m^*} = \frac{P_0^2}{3\hbar^2} \left(\frac{2}{E_0^2} + \frac{1}{(E_0 + \Delta_0)^2} \right) + \frac{P_1^2}{3\hbar} \left(\frac{1}{(E_1 - E_0)^2} + \frac{2}{(E_1 - E_0 + \Delta_1)^2} \right). \quad (1.18)$$

Для всех материалов типа A_3B_5 $\chi < 1$. В частности, для GaAs $\chi \simeq 0.082$, а для InSb, в котором СОВ самое большое, $\chi \simeq 0.351$.

Будем искать ГУ для спинора ϕ в виде

$$\partial_z \phi = M \phi, \quad (1.19)$$

где M – пока неизвестная матрица.

Подставив это выражение в ограничение (1.16), получим следующее условие на матрицу M

$$M = A^{-1}(F - C), \quad (1.20)$$

где

$$\hat{A} = \sigma_0 + \frac{2m^* \gamma_c}{\hbar^3} (\sigma_y p_y - \sigma_x p_x), \quad (1.21)$$

$$\hat{C} = i \frac{m^* \gamma_c}{\hbar^4} \sigma_z (p_x^2 - p_y^2), \quad (1.22)$$

F – произвольная эрмитова матрица: $F = F^\dagger$.

Ограничения (1.16) оказывается недостаточно для определения ГУ. Потребуем инвариантности условия (1.19) по отношению к операции обращения времени. Оператор инверсии времени \hat{T} для полной огибающей функции обычно имеет вид: $\hat{T} = i\sigma_y \hat{K}$, где \hat{K} – оператор комплексного сопряжения. Однако граничное условие (1.19) написано не для полной ОФ, а лишь для ее z -компоненты. При инверсии времени меняется знак импульса электрона в плоскости ямы, поэтому в нашем случае оператор инверсии времени \hat{T} будет иметь вид: $\hat{T} = i\sigma_y \hat{K} \hat{P}$, где \hat{P} – оператор замены $p_x \rightarrow -p_x, p_y \rightarrow -p_y$.

Произведем преобразование функций, соответствующее операции инверсии времени $\phi = \hat{T}\psi$. Тогда, подставив это в (1.19), получим для функций с инвертированным временем

$$\partial_z \psi = \hat{T}^{-1} M \hat{T} \psi. \quad (1.23)$$

Из симметрии по отношению к инверсии времени следует, что ГУ для исходной функции ϕ и для функции с инвертированным временем ψ должно быть одинаковым. Отсюда следует дополнительное уравнение, которому должна удовлетворять матрица M

$$\hat{T}^{-1} M \hat{T} = M. \quad (1.24)$$

Используя это равенство, найдем явный вид эрмитовой матрицы F . При этом будем учитывать, что F может зависеть от p_x, p_y . Из (1.20) получаем $AM = F - C$, следовательно, $TAT^{-1}TMT^{-1} = T(F - C)T^{-1}$. Введем обозначения: $\tilde{A} = TAT^{-1}$, $\tilde{C} = TCT^{-1}$, $\tilde{M} = TMT^{-1}$, $\tilde{F} = TFT^{-1}$. Тогда $\tilde{A}\tilde{M} = \tilde{F} - \tilde{C}$. Прямой проверкой убеждаемся, что $\tilde{A} = A$, $\tilde{C} = C$, а из инвариантности ГУ относительно инверсии времени (1.24) следует $\tilde{M} = M$, значит $\tilde{F} = F$ и $TF = FT$. Так как матрица F эрмитова, ее можно разложить по базису из единичной матрицы и трех матриц Паули ($\sigma_0, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$)

$$F = c'_0 \sigma_0 + c'_x \sigma_x + c'_y \sigma_y + c'_z \sigma_z. \quad (1.25)$$

При этом коэффициенты в разложении должны быть действительными $(c'_i)^* = c'_i$ ($i = 0, x, y, z$).

Представим коэффициенты в виде $c'_i = c_i + f_i(p_x, p_y)$, где $f_i(p_x, p_y)$ – линейные функции p_x, p_y . Подставив явный вид F в $TF = FT$, получим: $c_0 = 1/R$, $f_0(p_x, p_y) = 0$, $c_x = c_y = c_z = 0$, $f_x(p_x, p_y) = (a_1 p_x + b_1 p_y)/\hbar$, $f_y(p_x, p_y) = (a_2 p_x + b_2 p_y)/\hbar$, $f_z(p_x, p_y) = (a_3 p_x + b_3 p_y)/\hbar$, где R, a_j, b_j ($j = 1, 2, 3$) – вещественные константы, определяемые свойствами гетерограницы. Таким образом,

$$F = \frac{1}{R}\sigma_0 + \frac{a_1 p_x + b_1 p_y}{\hbar}\sigma_x + \frac{a_2 p_x + b_2 p_y}{\hbar}\sigma_y + \frac{a_3 p_x + b_3 p_y}{\hbar}\sigma_z. \quad (1.26)$$

и общее ГУ принимает вид

$$\left[1 - i\frac{R\hat{p}_z}{\hbar} - i\frac{2m^*\gamma_c R}{\hbar^4}(\sigma_y p_y - \sigma_x p_x)\hat{p}_z - i\frac{m^*\gamma_c R}{\hbar^4}\sigma_z(p_x^2 - p_y^2) + R\frac{a_1 p_x + b_1 p_y}{\hbar}\sigma_x + R\frac{a_2 p_x + b_2 p_y}{\hbar}\sigma_y + R\frac{a_3 p_x + b_3 p_y}{\hbar}\sigma_z \right] \phi|_{z=0} = 0. \quad (1.27)$$

Полученное ГУ, однако, содержит еще слишком много неизвестных параметров. Чтобы уменьшить число неизвестных, воспользуемся симметричными условиями. Симметрия C_{2v} допускает наличие в гамильтониане, а следовательно и в ГУ, только спиновых слагаемых типа Дрессельхауза и Рашбы. С учетом этой симметрии часть констант в ГУ (1.27) занулится (a_3, b_3), а часть выразится через другие ($b_2 = -a_1, a_2 = -b_1$). Введем обозначения $b_1 = (\chi + \chi^{int})$ и $a_1 = (2m^*\gamma_c^{int})/(\hbar^2 R)$. Физический смысл параметров $\chi^{int}, \gamma_c^{int}$ будет пояснен ниже.

Таким образом, ГУ для спинора ϕ , учитывающее спин-орбитальное взаимодействие в объеме и на интерфейсе симметрии C_{2v} , а также отсутствие центра инверсии в объемном кристалле имеет вид

$$\left[\sigma_0 - i\frac{R\hat{p}_z}{\hbar} - i\frac{2m^*\gamma_c R}{\hbar^4}(\sigma_y p_y - \sigma_x p_x)\hat{p}_z - i\frac{m^*\gamma_c R}{\hbar^4}\sigma_z(p_x^2 - p_y^2) + \frac{(\chi + \chi^{int})R}{\hbar}(\sigma_x p_y - \sigma_y p_x) - \frac{2m^*\gamma_c^{int}}{\hbar^3}(\sigma_y p_y - \sigma_x p_x) \right] \phi \Big|_{z=0} = 0. \quad (1.28)$$

Вещественная величина R зависит от микроскопического строения границы. Эта длина имеет смысл глубины локализации мелкого таммовского состоя-

ния, когда оно существует (для этого необходимо выполнение условия $R > 0$). Константы γ_c и χ определяются объемными параметрами, причем для GaAs $|\gamma_c| = 24,4 \text{ эВ} \times \text{Å}^3$ и $\chi = 0.082$; константы γ_c^{int} и χ^{int} характеризуют спин-орбитальное взаимодействие на интерфейсе. Стоит отметить, что ГУ (1.28) может быть получено непосредственно из требования эрмитовости однозонного гамильтониана (1.10)-(1.12), инвариантности задачи по отношению к обращению времени и симметрии интерфейса C_{2v} .

В рамках метода плавных ОФ для рассматриваемого случая высокого гетеробарьера стандартными ГУ являются нулевые. Далее будем считать отличие ГУ (1.28) от нулевых малым. Для этого длина R должна быть малой по сравнению с характерными длинами задачи, включая толщину 2D слоя по оси z . Используя теорию возмущений по малости R и параметрам СОВ, преобразуем ГУ (1.28) к более удобному виду $\hat{G}\phi|_{z=0} = 0$ с оператором \hat{G} , который с учетом членов до $R^2 p_i p_z$ ($i = x, y$) включительно будет иметь унитарный вид.

Пусть G – оператор ГУ в (1.28). Представим его в виде $\hat{G} = \hat{G}_1 + \hat{G}_2$, где $G_1^\dagger = G_1$, а $G_2^\dagger = -G_2$, т.е.

$$\hat{G}_1 = \sigma_0 + \frac{(\chi + \chi^{int})R}{\hbar}(\sigma_x p_y - \sigma_y p_x) - \frac{2m^* \gamma_c^{int}}{\hbar^3}(\sigma_y p_y - \sigma_x p_x), \quad (1.29)$$

$$\hat{G}_2 = -i \frac{R \hat{p}_z}{\hbar} - i \frac{2m^* \gamma_c R}{\hbar^4}(\sigma_y p_y - \sigma_x p_x) \hat{p}_z - i \frac{m^* \gamma_c R}{\hbar^4} \sigma_z (p_x^2 - p_y^2). \quad (1.30)$$

Далее вынесем G_1 и получим

$$\hat{G}_1(\sigma_0 + \hat{G}_1^{-1} \hat{G}_2)\phi|_{z=0} = 0. \quad (1.31)$$

Поскольку \hat{G}_1 – невырожденный оператор, то из (1.31) следует

$$(\sigma_0 + \hat{G}_1^{-1} \hat{G}_2)\phi|_{z=0} = 0. \quad (1.32)$$

Подставив явные выражения для \hat{G}_1 и \hat{G}_2 в (1.32) и учитывая только члены

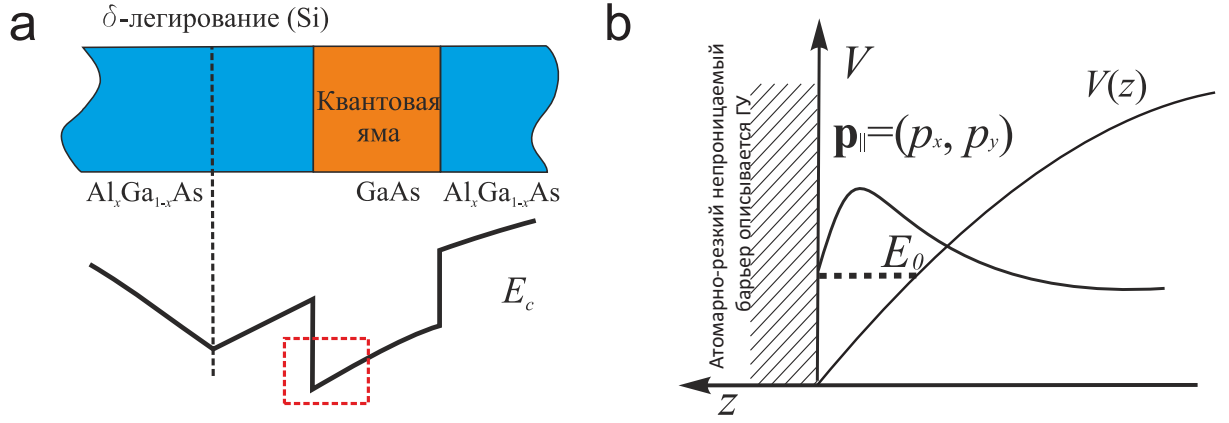


Рис. 1.3. а) Схематическое изображение рассматриваемой структуры. б) Эффективный потенциал, в котором находятся электроны.

до второго порядка по импульсу включительно, получим:

$$\left[\sigma_0 - i \left(\frac{R\hat{p}_z}{\hbar} + \frac{2m^*\tilde{\gamma}_c R}{\hbar^4} (\sigma_y p_y - \sigma_x p_x) \hat{p}_z + \frac{m^*\gamma_c R}{\hbar^4} \sigma_z (p_x^2 - p_y^2) - \frac{\tilde{\chi} R^2}{\hbar^2} (\sigma_x p_y - \sigma_y p_x) \hat{p}_z \right) \right] \phi \Big|_{z=0} = 0, \quad (1.33)$$

где $\tilde{\gamma}_c = \gamma_c + \gamma_c^{int}$, $\tilde{\chi} = \chi + \chi^{int}$.

Из (1.33) следует, что искомый оператор $\hat{\Gamma}$ имеет вид:

$$\hat{\Gamma} = \sigma_0 - i \left[\frac{R\hat{p}_z}{\hbar} + \frac{2m^*\tilde{\gamma}_c R}{\hbar^4} (\sigma_y p_y - \sigma_x p_x) \hat{p}_z + \frac{m^*\gamma_c R}{\hbar^4} \sigma_z (p_x^2 - p_y^2) - \frac{\tilde{\chi} R^2}{\hbar^2} (\sigma_x p_y - \sigma_y p_x) \hat{p}_z \right]. \quad (1.34)$$

1.2. Влияние интерфейса на спиновое расщепление спектра 2D состояний в отсутствие магнитного поля

1.2.1. Широкая квантовая яма

Односторонне легированную квантовую яму GaAs будем рассматривать как квазитреугольную потенциальную яму $V(z)$, электроны в которой прижаты внутренним электрическим полем $\mathbf{F} = (0, 0, F)$ к гетероинтерфейсу (001) GaAs / Al_xGa_{1-x}As (см. Рис. 1.3). Разрыв зон на интерфейсе ($z = 0$) считается

большим и атомарно резким, гетербарьер - непроницаемым. Динамику электрона вне интерфейса ($z < 0$) будем описывать в рамках однозонного уравнения эффективной массы для двухкомпонентного спинора ϕ , составленного из двух огибающих функций. Этот спинор при $z = 0$ должен подчиняться "одностороннему" феноменологическому ГУ (1.28), содержащему информацию о микроскопическом строении интерфейса. В этом разделе будет выведен эффективный спиновый 2D гамильтониан зоны проводимости и получены интерфейсные вклады в параметры Дрессельхауза и Рашбы.

Исходная 3D задача имеет вид

$$\hat{H}\phi = E\phi, \quad \hat{\Gamma}\phi|_{z=0} = 0, \quad (1.35)$$

с гамильтонианом (1.10)-(1.12) и оператором ГУ $\hat{\Gamma}$ (1.33).

При помощи унитарного (с указанной выше точностью) преобразования $\psi = \hat{\Gamma}\phi$ сведем задачу к новой, более простой задаче, со стандартными (нулевыми) ГУ и перенормированным гамильтонианом

$$(\hat{H} + \delta\hat{H})\psi = E\psi, \quad \psi|_{z=0} = 0, \quad (1.36)$$

где

$$\delta\hat{H} = -R\partial_z V + \frac{\tilde{\chi}R^2}{\hbar}(\sigma_x p_y - \sigma_y p_x)\partial_z V - \frac{2m^*\tilde{\gamma}_c R}{\hbar^3}(\sigma_y p_y - \sigma_x p_x)\partial_z V. \quad (1.37)$$

Усредняя перенормированный 3D гамильтониан по функциям основной подзоны, получим эффективный 2D гамильтониан, который содержит термы Дрессельхауза и Бычкова-Рашбы. В соответствующие константы α_{BIA} и α_{SIA} помимо известных объемных вкладов, будут входить как скалярный вклад интерфейса (R), так и перенормированные параметры спин-орбитального взаимодействия типа Дрессельхауза ($\tilde{\gamma}_c = \gamma_c + \gamma_c^{int}$) и типа Рашбы ($\tilde{\chi} = \chi + \chi^{int}$):

$$\hat{H}_{2D} = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m^*} + \alpha_{BIA}(\sigma_y p_y - \sigma_x p_x) + \alpha_{SIA}(\sigma_x p_y - \sigma_y p_x), \quad (1.38)$$

$$\alpha_{BIA} = \frac{\gamma_c}{\hbar^3}(\hat{p}_z^2)_{00} + \frac{2m^*\tilde{\gamma}_c}{\hbar^3}eFR, \quad (1.39)$$

$$\alpha_{SIA} = -eF \left(a_{SO} + \frac{\tilde{\chi}R^2}{\hbar} \right), \quad (1.40)$$

где $F = -(\partial_z V/e)_{00}$ – среднее электрическое поле в гетероструктуре, $-e$ – заряд электрона.

1.2.2. Узкая квантовая яма

В этом разделе будет рассмотрено влияние интерфейсов на спиновое расщепление электронного спектра в узкой КЯ. Под узкой КЯ понимается система, в которой энергия размерного квантования существенно превосходит энергию взаимодействия электрона со встроенным электрическим полем. В этом случае необходимо учитывать ИСОВ на двух гетерограницах, неэквивалентность которых может существенно влиять на спиновое расщепление спектра.

Рассматривается КЯ толщиной d . Направление оси z совпадает с внешней нормалью к левой границе. Точка $z = 0$ соответствует середине КЯ. Динамика электрона вне интерфейсов описывается гамильтонианом в приближении огибающих функций

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V(z) + \hat{H}_{SO}, \quad \hat{H}_0 = \frac{\hat{p}_z^2}{2m^*}, \quad \hat{H}_{SO} = \hat{H}_{BIA} + \hat{H}_{SIA}. \quad (1.41)$$

Микроскопическое строение интерфейсов, которые в общем случае неэквивалентны, учитывается введением соответствующих ГУ с разными феноменологическими константами

$$\hat{\Gamma}_1 \phi(z)|_{z=d/2} = 0, \quad \hat{\Gamma}_2 \phi(z)|_{z=-d/2} = 0, \quad (1.42)$$

$$\hat{\Gamma}_1 = \left[\sigma_0 - i \frac{R_1 \hat{p}_z}{\hbar} - i \frac{2m^* \gamma_c R_1}{\hbar^4} (\sigma_y p_y - \sigma_x p_x) \hat{p}_z + \frac{(\chi + \chi_1^{int}) R}{\hbar} (\sigma_x p_y - \sigma_y p_x) - \frac{2m^* \gamma_{c1}^{int}}{\hbar^3} (\sigma_y p_y - \sigma_x p_x) \right], \quad (1.43)$$

$$\hat{\Gamma}_2 = \left[\sigma_0 + i \frac{R_2 \hat{p}_z}{\hbar} + i \frac{2m^* \gamma_c R_2}{\hbar^4} (\sigma_y p_y - \sigma_x p_x) \hat{p}_z - \frac{(\chi + \chi_2^{int}) R}{\hbar} (\sigma_x p_y - \sigma_y p_x) - \frac{2m^* \gamma_{c2}^{int}}{\hbar^3} (\sigma_y p_y - \sigma_x p_x) \right]. \quad (1.44)$$

Учтем взаимодействие с интерфейсными потенциалами точно, а объемное СОВ \hat{H}_{SO} и плавный потенциал $V(z)$, среднее значение которого существенно меньше, чем энергия размерного квантования, рассмотрим как возмущение.

Задача нулевого приближения имеет вид

$$\hat{H}_0 \phi^{(0)}(z) = E^{(0)} \phi^{(0)}(z), \quad \hat{\Gamma}_1 \phi^{(0)}(z)|_{z=d/2} = 0, \quad \hat{\Gamma}_2 \phi^{(0)}(z)|_{z=-d/2} = 0. \quad (1.45)$$

Введем обозначения: $\alpha_{1,2} = (2m^* \gamma_c R_{1,2} p_{||})/\hbar^3$, $\beta_{1,2} = (\tilde{\chi}_{1,2} R_{1,2} p_{||})/\hbar$, $\alpha_{1,2}^{int} = (2m^* \gamma_{c1,2}^{int} p_{||})/\hbar^3$, $a_1 = \alpha_1^{int} e^{i\phi} + i\beta_1 e^{-i\phi}$, $a_2 = \alpha_2^{int} e^{i\phi} - i\beta_2 e^{-i\phi}$, где $p_x = p_{||} \cos \phi$, $p_y = p_{||} \sin \phi$.

В нижнем порядке по скалярным вкладам интерфейсов и параметрам ИС-ОВ собственные значения и собственные функции задачи (1.45) имеют вид

$$k_{\pm} = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} E^{(0)}} = k_0 + \Delta k_{\pm}, \quad k_0 = \frac{\pi n}{d}, \quad \Delta k_{\pm} = \delta k_R \pm \delta k_{SO}, \quad (1.46)$$

$$\delta k_R = \frac{R_1 + R_2}{d} k_0, \quad (1.47)$$

$$\delta k_{SO} = k_0 \frac{\Delta}{d}, \quad \Delta = |(\alpha_1 + \alpha_2) e^{i\phi} + a_1 R_1 + a_2 R_2|. \quad (1.48)$$

$$E_{\pm}^{(0)} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m^*} \left(1 + 2 \frac{R_1 + R_2}{d} \pm 2 \frac{\Delta}{d} \right). \quad (1.49)$$

$$\phi_{\pm}^{(0)}(z) = \begin{pmatrix} C_1^{\pm} e^{ik_{\pm} z} + C_3^{\pm} e^{-ik_{\pm} z} \\ C_2^{\pm} e^{ik_{\pm} z} + C_4^{\pm} e^{-ik_{\pm} z} \end{pmatrix}, \quad (1.50)$$

$$|C_1^{\pm}|^2 = \frac{1}{4d} \left(1 - \frac{R_1 + R_2}{d} \mp \frac{\Delta}{d} \right)^{-1}, \quad (1.51)$$

$$C_2^\pm = \mp C_1^\pm \frac{(\alpha_1 + \alpha_2)e^{-i\phi} + a_1^* R_1 + a_2^* R_2}{\Delta}, \quad (1.52)$$

$$C_3^\pm = -e^{-ik_0 d} \left[1 + ik_0(R_2 - R_1) \pm \frac{(\alpha_2 - \alpha_1)e^{i\phi} + a_2 R_2 - a_1 R_1}{(\alpha_1 + \alpha_2)e^{i\phi} + a_1 R_1 + a_2 R_2} \Delta \right] C_1^\pm, \quad (1.53)$$

$$C_4^\pm = -e^{-ik_0 d} \left[\mp \frac{(\alpha_1 + \alpha_2)e^{i\phi} + a_1^* R_1 + a_2^* R_2}{\Delta} - ik_0(\alpha_2 - \alpha_1)e^{-i\phi} - ik_0(a_2^* R_2 - a_1^* R_1) \right] C_1^\pm. \quad (1.54)$$

Раскладывая волновую функцию по собственным функциям задачи (1.45) $\phi(z) = A\phi_+^{(0)} + B\phi_-^{(0)}$, получим

$$\begin{pmatrix} E_+^{(0)} + \langle \phi_+^{(0)} | \delta \hat{H} | \phi_+^{(0)} \rangle & \langle \phi_+^{(0)} | \delta \hat{H} | \phi_-^{(0)} \rangle \\ \langle \phi_-^{(0)} | \delta \hat{H} | \phi_+^{(0)} \rangle & E_-^{(0)} + \langle \phi_-^{(0)} | \delta \hat{H} | \phi_-^{(0)} \rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}. \quad (1.55)$$

Спиновое расщепление спектра 2D состояний имеет стандартный вид

$$E_{SS} = 2p_{\parallel} \sqrt{\alpha_{BIA}^2 + \alpha_{SIA}^2 + 2\alpha_{BIA}\alpha_{SIA} \sin 2\phi}, \quad (1.56)$$

однако α_{BIA} и α_{SIA} перенормированы за счет взаимодействия электрона с атомарно резкими потенциалами на двух гетероинтерфейсах и определяются выражениями

$$\alpha_{BIA} = \frac{2k_0^2}{\hbar} \left[\frac{1}{2}\gamma_c + \gamma_c \frac{R_1 + R_2}{d} + \frac{\tilde{k}_0^2}{k_0^2} \frac{(\tilde{\gamma}_{c1}R_1 + \tilde{\gamma}_{c2}R_2)}{d} + \frac{eF_1 d}{2E_0} \frac{(\tilde{\gamma}_{c2}R_2 - \tilde{\gamma}_{c1}R_1)}{d} \right], \quad (1.57)$$

$$\alpha_{SIA} = -a_{SO}eF_2 + \frac{2\tilde{E}_0}{\hbar} \frac{(\tilde{\chi}_1 R_1^2 - \tilde{\chi}_2 R_2^2)}{d} - \frac{eF_1 d}{2E_0} \frac{E_0}{\hbar} \frac{(\tilde{\chi}_1 R_1^2 + \tilde{\chi}_2 R_2^2)}{d}. \quad (1.58)$$

Для нижней подзоны ($n = 1$):

$$E_0 = \frac{\hbar^2 k_0^2}{2m^*}, \quad k_0 = \frac{\pi}{d}, \quad \tilde{k}_0 = \sqrt{\frac{2m^*}{\hbar^2} \tilde{E}_0}, \quad (1.59)$$

$$\tilde{E}_0 = E_0 - \frac{1}{2} \langle \phi_0(z) | z V'(z) | \phi_0(z) \rangle, \quad (1.60)$$

$$eF_1 = \langle \phi_0(z) | V'(z) | \phi_0(z) \rangle, \quad (1.61)$$

$$eF_2 = \langle \phi_0(z) | V'(z) | \phi_0(z) \rangle - \frac{R_1 + R_2}{d} \langle \phi_0(z) | z V''(z) | \phi_0(z) \rangle - 2k_0^2 (R_2 - R_1) \left(\langle \phi_0(z) | V(z) | \phi_0(z) \rangle - \frac{1}{d} \int_{-d/2}^{d/2} V(z) dz \right), \quad (1.62)$$

где

$$\phi_0(z) = \sqrt{\frac{2}{d}} \cos k_0 z, \quad \langle \phi_0(z) | \hat{A} | \phi_0(z) \rangle = \int_{-d/2}^{d/2} |\phi_0(z)|^2 \hat{A} dz. \quad (1.63)$$

Спиновое расщепление спектра анизотропно в структурах, где оба параметра α_{BIA} и α_{SIA} отличны от нуля. Обычно считается [33], что α_{SIA} пропорциональна среднему электрическому полю в структуре, т.е. отлична от нуля только в ямах с асимметричным легированием или при приложении внешнего поля. Однако из выражения (1.58) следует, что учет ИСОВ приводит к анизотропии спинового расщепления даже в номинально симметричных ямах с нулевым средним электрическим полем в меру неэквивалентности границ по параметрам $\tilde{\chi}_1 R_1^2$ и $\tilde{\chi}_2 R_2^2$. Этот результат может объяснить экспериментальные данные [1], где наблюдалась существенно ненулевая α_{SIA} в симметричной КЯ (см. Рис.1.4).

Оценим $\tilde{\chi}_1 R_1^2$ и $\tilde{\chi}_2 R_2^2$ из сравнения (1.58) с экспериментом [1]. Используя данные для симметричной и наиболее асимметричной ям, получим $\tilde{\chi}_1 R_1^2 \simeq 4.571 \text{ \AA}^2$, $\tilde{\chi}_2 R_2^2 \simeq 3.123 \text{ \AA}^2$.

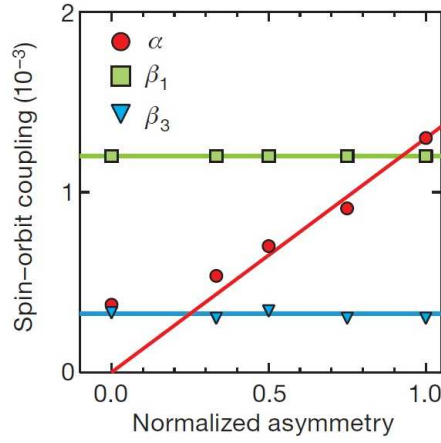


Рис. 1.4. $\alpha = \alpha_{SIA}/v_F$, $\beta_1 = \alpha_{BIA}/v_F$, $\beta_3 \propto \gamma_c$; по оси абсцисс отложено отношение разницы концентраций легирующих примесей с двух сторон КЯ к их сумме. Результаты работы [1].

1.3. Интерфейсные вклады в зеемановское расщепление уровней Ландау

1.3.1. Граничное условие в магнитном поле

В данном разделе будет получено ГУ для ОФ зоны проводимости на гетероинтерфейсе типа (001) GaAs/AlGaAs в наклонном магнитном поле $\mathbf{B} = (B_x, B_y, B_z)$ путем обобщения выведенного ранее ГУ без магнитного поля. Следуя [112], заменим оператор импульса оператором обобщенного импульса: $\hat{p}_i \rightarrow \hat{\pi}_i = \hat{p}_i + eA_i/c$, где \mathbf{A} – вектор-потенциал магнитного поля. Некоммутирующие компоненты операторов импульса должны быть заменены на симметризованные комбинации: $\hat{\pi}_i \hat{\pi}_j \rightarrow (\hat{\pi}_i \hat{\pi}_j + \hat{\pi}_j \hat{\pi}_i)/2 \equiv \{\pi_i, \pi_j\}$.

Записав с учетом этого гамильтониан для гетероструктуры (1.10) – (1.12) и ГУ на гетероинтерфейсе $\hat{\Gamma}\phi|_{z=0} = 0$ с оператором $\hat{\Gamma}$ (1.34), получим гамильтониан и оператор ГУ в магнитном поле:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\pi}^2}{2m^*} + V(z) + \hat{H}_{BIA} + \hat{H}_{SIA} - \frac{1}{2}g^*\mu_B(\sigma\mathbf{B}), \quad (1.64)$$

$$\hat{H}_{BIA} = \frac{\gamma_c}{\hbar^3}(\{\sigma_x \hat{\pi}_x, (\hat{\pi}_y^2 - \hat{\pi}_z^2)\} + \{\sigma_y \hat{\pi}_y, (\hat{\pi}_z^2 - \hat{\pi}_x^2)\} + \{\sigma_z \hat{\pi}_z, (\hat{\pi}_x^2 - \hat{\pi}_y^2)\}), \quad (1.65)$$

$$\hat{H}_{SIA} = a_{SO}(\sigma_x \pi_y - \sigma_y \pi_x) \partial_z V(z), \quad (1.66)$$

$$\hat{\Gamma} = \sigma_0 - i \left(\frac{R\hat{\pi}_z}{\hbar} + \frac{2m^*\tilde{\gamma}_c R}{\hbar^4} \{(\sigma_y \hat{\pi}_y - \sigma_x \hat{\pi}_x), \hat{\pi}_z\} + \frac{m^*\gamma_c R}{\hbar^4} \sigma_z (\hat{\pi}_x^2 - \hat{\pi}_y^2) - \frac{\tilde{\chi} R^2}{\hbar^2} \{(\sigma_x \hat{\pi}_y - \sigma_y \hat{\pi}_x), \hat{\pi}_z\} \right). \quad (1.67)$$

где $|\mu_B|$ – магнетон Бора, g^* – g -фактор объемного GaAs ($g^* = -0.44$).

Учтем влияние слабой непараболичности зоны проводимости GaAs. Непараболический вклад в объемный 3D гамильтониан может быть получен в четвертом порядке kp -теории возмущений. Значит, чтобы последовательно вывести непараболический вклад в гамильтониан и ГУ, нужно все вычисления производить в четвертом порядке kp -теории в магнитном поле. Однако эти вычисления слишком громоздки. Поэтому мы пойдем другим путем. Как упоминалось ранее, ГУ (1.28) может быть получено непосредственно из однозонного гамильтониана, поэтому мы воспользуемся известным однозонным Γ_{6c} гамильтонианом с учетом непараболического вклада и выведем непараболический вклад в ГУ из общих требований его эрмитовости и инвариантности задачи относительно инверсии времени. Для упрощения вычислений пренебрежем пока вкладом типа VIA и SIA, тогда 3D гамильтониан зоны проводимости в магнитном поле с учетом непараболического слагаемого \hat{H}_{np} имеет вид

$$\hat{H}_{3D} = \frac{\hat{\pi}^2}{2m^*} + V(z) + \hat{H}_{np} - \frac{1}{2}\mu_B g^* \boldsymbol{\sigma} \mathbf{B}. \quad (1.68)$$

В нижнем порядке по спин-орбитальному взаимодействию [65]

$$\hat{H}_{np} = -\frac{1}{2}\mu_B \frac{h_1 \pi^2}{\hbar^2} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{B}, \quad (1.69)$$

где h_1 определяется параметрами зонной структуры объемного полупроводника.

Требование эрмитовости гамильтониана на правом полупространстве $\langle \psi | \hat{H} | \phi \rangle = \langle \phi | \hat{H} | \psi \rangle^*$ после интегрирования по частям приводит к занулению поверхностного вклада

$$\left[\psi^\dagger \hat{A} \partial_z \phi - (\hat{A} \partial_z \psi)^\dagger \phi \right] \Big|_{z=0} = 0, \quad (1.70)$$

где

$$\hat{A} = \sigma_0 + \frac{m^*|\mu_B|h_1}{\hbar^2}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{B}. \quad (1.71)$$

Если искать ГУ в виде $\partial_z\phi = \hat{M}\phi$, то матрица \hat{M} должна удовлетворять условию $\hat{M} = \hat{A}^{-1}\tilde{F}$, где \tilde{F} – произвольная эрмитовая матрица: $\tilde{F} = \tilde{F}^\dagger$. Для уточнения вида \tilde{F} потребуем инвариантности задачи относительно инверсии времени. Оператор инверсии времени на этот раз будет иметь вид $\hat{T} = i\sigma_y\hat{K}\hat{P}'$, где \hat{P}' – оператор, заменяющий $p_x \rightarrow -p_x, p_y \rightarrow -p_y, \mathbf{B} \rightarrow -\mathbf{B}$. Наконец, найдем искомую эрмитовую матрицу \tilde{F}

$$\tilde{F} = \frac{1}{R}\sigma_0. \quad (1.72)$$

Таким образом, ГУ, учитывающее непараболический вклад, но без учета других спиновых слагаемых, имеет вид

$$\left[1 - i\frac{R\hat{p}_z}{\hbar} - i\frac{|\mu_B|m^*h_1R}{\hbar^3}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{B}\hat{p}_z \right] \phi \Big|_{z=0} = 0. \quad (1.73)$$

В нижнем порядке по СОВ добавим непараболический вклад (последнее слагаемое) в оператор ГУ (1.67) и получим оператор ГУ, который учитывает СОВ в объеме и на интерфейсе, асимметрию КЯ и непараболичность зоны проводимости

$$\hat{\Gamma} = \sigma_0 - i\left(\frac{R\hat{\pi}_z}{\hbar} + \frac{2m^*\tilde{\gamma}_cR}{\hbar^4}\{(\sigma_y\hat{\pi}_y - \sigma_x\hat{\pi}_x), \hat{\pi}_z\} + \frac{m^*\gamma_cR}{\hbar^4}\sigma_z(\hat{\pi}_x^2 - \hat{\pi}_y^2) - \frac{(\chi + \chi^{int})R^2}{\hbar^2}\{(\sigma_x\hat{\pi}_y - \sigma_y\hat{\pi}_x), \hat{\pi}_z\} + \frac{|\mu_B|m^*h_1R}{\hbar^3}\boldsymbol{\sigma}\mathbf{B}\hat{p}_z \right). \quad (1.74)$$

1.3.2. Зеемановское расщепление уровней Ландау

Этот раздел посвящен вычислению интерфейсных вкладов в g -фактор электрона проводимости для заряженных гетеропереходов на основе соединений A_3B_5 . Результаты также применимы для широких GaAs/AlGaAs КЯ с большим встроенным электрическим полем (см. Рис. 1.3). Как и в случае отсутствия магнитного поля, динамику электрона вне интерфейса будем описывать гамильтонианом приближения эффективной массы, а информацию о микроскопическом

строении интерфейса учтем введением соответствующего ГУ. Исходная 3D задача имеет вид

$$\hat{H}\phi = E\phi, \quad \hat{\Gamma}\phi|_{z=0} = 0, \quad (1.75)$$

где 3D гамильтониан

$$\hat{H} = \frac{\hat{\pi}^2}{2m^*} + V(z) - \frac{1}{2}\mu_B g^* \boldsymbol{\sigma} \mathbf{B} + \hat{H}_{BIA} + \hat{H}_{SIA} + \hat{H}_{np} \quad (1.76)$$

учитывает отсутствие центра инверсии у кристалла \hat{H}_{BIA} (1.65), асимметрию ямы \hat{H}_{SIA} (1.66), непараболический вклад в объемный g -фактор \hat{H}_{np} (1.69), а оператор $\hat{\Gamma}$ подчиняется (1.74) и учитывает как скалярный вклад интерфейса (R), так и спиновый ($\tilde{\chi}$, $\tilde{\gamma}_c$).

Преобразуем задачу к новой, более простой, с нулевым ГУ и перенормированным за счет интерфейсного вклада гамильтонианом

$$(\hat{H} + \delta\hat{H})\psi = E\psi, \quad \psi|_{z=0} = 0, \quad (1.77)$$

$$\delta\hat{H} = [\hat{\Gamma}, \hat{H}]. \quad (1.78)$$

Вычисление коммутатора $[\hat{\Gamma}, \hat{H}]$ приводит к довольно громоздкому выражению для $\delta\hat{H}$, которое приведено в Приложении А.

Рассмотрим случай наклонного магнитного поля $\mathbf{B} = (B_x, B_y, B_z)$ и выберем калибровку вектор-потенциала в виде $\mathbf{A} = (B_y z - B_z y, -B_x z, 0)$. Пусть $q = -e$ – заряд электрона.

После усреднения по быстрому движению электрона в направлении размерного квантования (ось z), получим эффективный 2D гамильтониан в n -ой подзоне $\hat{H}_{2D} = (\hat{H})_{nn} + (\delta\hat{H})_{nn}$, где выражения для $(\hat{H})_{nn}$ и $(\delta\hat{H})_{nn}$ приведены в Приложении А. Если за начало отсчета в n -ой подзоне выбрать E_n , то эффективный 2D гамильтониан для этой подзоны будет представлять собой сумму орбитального (\hat{H}_{n0}) и спинового ($\delta\hat{H}_s$) вкладов

$$\hat{H}_{2D} = \hat{H}_{n0} + \delta\hat{H}_s, \quad (1.79)$$

где

$$\begin{aligned} \hat{H}_{n0} = & \frac{1}{2m^*} \left(\hat{p}_x - \frac{q}{c} B_y z_{nn} + \frac{q}{c} B_z y \right)^2 + \frac{1}{2m^*} \left(\hat{p}_y + \frac{q}{c} B_x z_{nn} \right)^2 + \\ & + \frac{qR}{m^*c} \left(\hat{p}_x - \frac{q}{c} B_y z_{nn} + \frac{q}{c} B_z y \right) B_y - \frac{qR}{m^*c} \left(\hat{p}_y + \frac{q}{c} B_x z_{nn} \right) B_x - R(\partial_z V)_{nn} + \\ & + \frac{q^2}{2m^*c^2} (B_x^2 + B_y^2) [(z^2)_{nn} - z_{nn}^2], \quad (1.80) \end{aligned}$$

а в $\delta\hat{H}_s$ входят все остальные слагаемые из \hat{H}_{2D} .

Дальнейшее усреднение будем проводить по собственным функциям орбитальной части эффективного 2D гамильтониана, т.е. за нулевое приближение будем брать задачу с гамильтонианом \hat{H}_{n0} . Несколько перепишем выражение для \hat{H}_{n0}

$$\begin{aligned} \hat{H}_{n0} = & \frac{1}{2m^*} \left[\hat{p}_x - \frac{q}{c} B_y (z_{nn} - R) + \frac{q}{c} B_z y \right]^2 + \frac{1}{2m^*} \left[\hat{p}_y + \frac{q}{c} B_x (z_{nn} - R) \right]^2 - \\ & - \frac{q^2 R^2}{2m^*c^2} (B_x^2 + B_y^2) - R(\partial_z V)_{nn} + \frac{q^2}{2m^*c^2} (B_x^2 + B_y^2) [(z^2)_{nn} - z_{nn}^2]. \quad (1.81) \end{aligned}$$

Далее выполним преобразование

$$\psi = \hat{S}\zeta, \quad \hat{S} = \exp \left[\frac{iq}{\hbar c} B_y (z_{nn} - R)x \right] \exp \left[-\frac{iq}{\hbar c} B_x (z_{nn} - R)y \right]. \quad (1.82)$$

После этого гамильтониан нулевого приближения сведется к следующему виду

$$\begin{aligned} \hat{H}_{n0} = & \frac{1}{2m^*} \left(\hat{p}_x + \frac{q}{c} B_z y \right)^2 + \frac{1}{2m^*} \hat{p}_y^2 - \frac{q^2 R^2}{2m^*c^2} (B_x^2 + B_y^2) - \\ & - R(\partial_z V)_{nn} + \frac{q^2}{2m^*c^2} (B_x^2 + B_y^2) ((z^2)_{nn} - z_{nn}^2). \quad (1.83) \end{aligned}$$

Это выражение определяет набор уровней Ландау, сдвинутых по энергии за счет магнитного (B_x, B_y) и электрического (F) полей.

Проведя аналогичное преобразование в выражении для спинового вклада в эффективный 2D гамильтониан, получим громоздкое выражение, которое приведено в Приложении А. Затем усредним спиновый вклад по N -ому уровню Ландау

$$\begin{aligned}
\langle N|\delta\hat{H}_s|N\rangle &= \frac{2m^*\tilde{\gamma}_c q R}{\hbar^3 c} \left(\frac{(p_z^2)_{nn}}{m^*} - R(\partial_z V)_{nn} \right) (\sigma_x B_y + \sigma_y B_x) - \\
&- \frac{\tilde{\chi} R^2 q}{\hbar c} \left(\frac{(p_z^2)_{nn}}{m^*} - (\partial_z V)_{nn} \right) (\sigma_x B_x + \sigma_y B_y) + \frac{\gamma_c q}{\hbar^3 c} ((p_z^2 z)_{nn} - (p_z^2)_{nn} z_{nn}) (\sigma_y B_x + \sigma_x B_y) + \\
&+ \frac{a_{SO} q}{c} ((z \partial_z V)_{nn} - z_{nn} (\partial_z V)_{nn}) (\sigma_x B_x + \sigma_y B_y) - \\
&- \frac{2m^*\tilde{\gamma}_c R q}{\hbar^3 c} (\sigma_y B_x + \sigma_x B_y) ((z \partial_z V)_{nn} - z_{nn} (\partial_z V)_{nn}) + \\
&+ \frac{2\tilde{\gamma}_c R q^2}{\hbar^2 c^2} |B_z| \left(N + \frac{1}{2} \right) (\sigma_x B_y + \sigma_y B_x) - \frac{\tilde{\chi} R^2 q^2}{m^* c^2} |B_z| \left(N + \frac{1}{2} \right) (\sigma_x B_x + \sigma_y B_y) - \\
&- \frac{1}{2} g^* \mu_B \boldsymbol{\sigma} \mathbf{B} - \frac{1}{2} \frac{\mu_B h_1}{\hbar^2} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{B} \left[(\hat{p}_z^2)_{nn} + \frac{2e\hbar |B_z|}{c} \left(N + \frac{1}{2} \right) \right] - \\
&- \frac{|\mu_B| m^* h_1 R}{\hbar^2} (\partial_z V)_{nn} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{B}. \quad (1.84)
\end{aligned}$$

Таким образом, после усреднений по быстрому движению электрона вдоль нормали и по N -му уровню Ландау получен спиновый гамильтониан, который может быть представлен в следующем виде

$$\hat{H}_N = \langle N|\hat{H}_{n0} + \delta\hat{H}_s|N\rangle = \frac{\hbar e |B_z|}{m^* c} \left(N + \frac{1}{2} \right) - \frac{e^2 R^2}{2m^* c^2} (B_x^2 + B_y^2) - e F R - \frac{1}{2} \mu_B g_{ij} \sigma_i B_j, \quad (1.85)$$

где:

$$\begin{aligned}
g_{xx} = g_{yy} = g^* &+ \frac{2\tilde{\chi} R^2 q}{\hbar c \mu_B} \left[\frac{(p_z^2)_{nn}}{m^*} - R(\partial_z V)_{nn} \right] - \frac{2a_{SO} q}{c \mu_B} [(z \partial_z V)_{nn} - z_{nn} (\partial_z V)_{nn}] + \\
&+ \frac{2\tilde{\chi} R^2 q^2}{m^* c^2 \mu_B} |B_z| \left(N + \frac{1}{2} \right) + \frac{2m^* h_1}{\hbar^2} \left[\frac{(\hat{p}_z^2)_{nn}}{2m^*} - R(\partial_z V)_{nn} \right] + \frac{2e h_1 |B_z|}{\hbar c} \left(N + \frac{1}{2} \right), \quad (1.86)
\end{aligned}$$

$$g_{zz} = g^* + \frac{2m^* h_1}{\hbar^2} \left[\frac{(\hat{p}_z^2)_{nn}}{2m^*} - R(\partial_z V)_{nn} \right] + \frac{2e h_1 |B_z|}{\hbar c} \left(N + \frac{1}{2} \right), \quad (1.87)$$

$$g_{xy} = g_{yx} = -\frac{4m^*\tilde{\gamma}_c q R}{\hbar^3 c \mu_B} \left[\frac{(p_z^2)_{nn}}{m^*} - R(\partial_z V)_{nn} \right] - \frac{2\gamma_c q}{\hbar^3 c \mu_B} [(p_z^2 z)_{nn} - (p_z^2)_{nn} z_{nn}] + \\ + \frac{4m^*\tilde{\gamma}_c R q}{\hbar^3 c \mu_B} [(z \partial_z V)_{nn} - z_{nn}(\partial_z V)_{nn}] - \frac{4\tilde{\gamma}_c R q^2}{\hbar^2 c^2 \mu_B} |B_z| \left(N + \frac{1}{2} \right). \quad (1.88)$$

Тензор $g_{ij}(B) = g_{ij}(0) + d_{ij}|B_z|$ анизотропен в плоскости $i, j = x, y$ и неаналитически зависит от B_z из-за специфики квантования Ландау. Его компоненты в предположении $F(z) = \text{const}$ для основной подзоны определяются выражениями:

$$g_{zz}(0) = g^* + \frac{2m^* h_1}{\hbar^2} \left(\frac{(p_z^2)_{00}}{2m^*} + eFR \right), \quad (1.89)$$

$$d_{zz} = \frac{2eh_1}{c\hbar} \left(N + \frac{1}{2} \right), \quad (1.90)$$

$$g_{xx}(0) = g_{yy}(0) = g^* + \frac{4\tilde{\chi} R^2 m_0 (p_z^2)_{00}}{\hbar^2 m^*} + \frac{2m^* h_1}{\hbar^2} \left(\frac{(p_z^2)_{00}}{2m^*} + eFR \right), \quad (1.91)$$

$$d_{xx} = d_{yy} = \frac{2eh_1}{c\hbar} \left(N + \frac{1}{2} \right) - \frac{4\tilde{\chi} R^2 m_0 e}{m^* c \hbar} \left(N + \frac{1}{2} \right), \quad (1.92)$$

$$g_{xy}(0) = g_{yx}(0) = \frac{4m_0 \gamma_c}{\hbar^4} [(p_z^2)_{00} z_{00} - (p_z^2 z)_{00}] - \frac{8m_0 m^* R \tilde{\gamma}_c (p_z^2)_{00}}{\hbar^4 m^*}, \quad (1.93)$$

$$d_{xy} = d_{yx} = \frac{8m_0 e \tilde{\gamma}_c R}{c \hbar^3} \left(N + \frac{1}{2} \right), \quad (1.94)$$

Слагаемые в (1.89)–(1.94), пропорциональные R , γ_c^{int} , χ^{int} и их комбинациям, представляют собой искомые интерфейсные вклады. При их занулении результаты (1.89)–(1.94) переходят в известные [65, 66, 113].

Константы α_{BIA} , α_{SIA} можно выразить через компоненты тензора $g_{\alpha\beta}$:

$$\alpha_{BIA} = \frac{\gamma_c}{\hbar^3} (\hat{p}_z^2)_{00} - eF \frac{m^* \hbar}{4m_0 (p_z^2)_{00}} \left[g_{xy} - \frac{4m_0 \gamma_c}{\hbar^4} ((p_z^2)_{00} z_{00} - (p_z^2 z)_{00}) \right], \quad (1.95)$$

$$\alpha_{SIA} = -eF \left[a_{SO} + \frac{m^* \hbar}{4m_0 (p_z^2)_{00}} (g_{xx} - g_{zz}) \right]. \quad (1.96)$$

1.4. Сравнение с экспериментом

Как упоминалось во введении, в недавних прецизионных измерениях спинового резонанса в GaAs квантовых ямах в режиме квантового эффекта Холла [2, 3] была обнаружена линейная зависимость g -фактора от квантующей компоненты магнитного поля $|B_z|$. Однако известные из литературы выражения для d_{zz} и d_{xx} равны друг другу из-за пренебрежения вкладом интерфейса и не могут описать эксперименты [2, 3], в которых наблюдалось значительное отличие d_{zz} и d_{xx} . Это различие может быть объяснено интерфейсным вкладом в d_{xx} (второе слагаемое в (1.92)). Также в экспериментах [2, 3] было обнаружено недиагональное слагаемое d_{xy} , которое, как видно из (1.94), определяется исключительно интерфейсным вкладом. Таким образом, построенная теория качественно, по крайней мере, описывает эксперимент [2, 3].

Для количественной проверки теории экспериментальной группой из ИФТТ РАН (Нефедов, Щепетильников, Кукушкин) методом ЭПР исследовано спиновое расщепление электронного спектра в широкой квантовой яме GaAs/AlGaAs с большим встроенным электрическим полем [12]. Для такой структуры обеспечивает применимость теории. Количественное описание экспериментальных данных возможно лишь при учете всех интерфейсных вкладов в g -фактор и $d_{\alpha\beta}$ (1.89)–(1.94).

Константу γ_c вычислим в расширенной (14-зонной) модели Кейна в четвертом порядке k -теории возмущений: $|\gamma_c| = 24.4 \text{ эВ} \times \text{\AA}^3$. Абсолютное значение γ_c отлично согласуется с объемными данными [60]. Однако в литературе существуют разногласия относительно знака γ_c . Так, у многих авторов $\gamma_c > 0$ [33, 49, 114], но в некоторых работах [54, 115] получено $\gamma_c < 0$. Параметр непараболичности h_1 определим из сравнения выражения (1.89) с результатами измерений фотолюминисценции [12].

Проведем сравнение теории с экспериментальными данными, учитывая оба возможных знака γ_c . Пересчитаем компоненты тензоров из главных осей в ку-

$R = -22 \text{ \AA}$			$2m^*h_1/\hbar^2 = 4.8 \text{ 1/\AA}$	
$\tilde{\gamma}_c = \gamma_c + \gamma_c^{int}$	$\gamma_c > 0$	$\gamma_c < 0$	$\tilde{\chi} = \chi + \chi^{int}$	
$\gamma_c \text{ (}\text{\AA}^3\text{)}$	24.4	-24.4	χ	0.082
$\tilde{\gamma}_c \text{ (}\text{\AA}^3\text{)}$	22.2	-13.2	$\tilde{\chi}$	0.015
$\gamma_c^{int} \text{ (}\text{\AA}^3\text{)}$	-2.2	11.2	χ^{int}	-0.067
$\alpha_{BIA} = \alpha_{BIA}^{(0)} + \alpha_{BIA}^{int}$			$\alpha_{SIA} = \alpha_{SIA}^{(0)} + \alpha_{SIA}^{int}$	
$\alpha_{BIA} \times \hbar \text{ (мЭВ)}$	3.5	-4.9	$\alpha_{SIA} \times \hbar \text{ (мЭВ)}$	-4.8
$\alpha_{BIA}^{(0)} \times \hbar \text{ (мЭВ)}$	7	-7	$\alpha_{SIA}^{(0)} \times \hbar \text{ (мЭВ)}$	-1.9
$\alpha_{BIA}^{int} \times \hbar \text{ (мЭВ)}$	-3.5	2.1	$\alpha_{SIA}^{int} \times \hbar \text{ (мЭВ)}$	-2.9

Таблица 1.1. Значения объемных и интерфейсных параметров задачи. Объемные величины γ_c и χ рассчитаны в модели Кейна, интерфейсные параметры γ_c^{int} и χ^{int} , а также параметр непараболичности h_1 извлечены из сравнения с экспериментом. Далее рассчитаны объемные константы Рашбы ($\alpha_{SIA}^{(0)}$) и Дресссельхауза ($\alpha_{BIA}^{(0)}$) и их интерфейсные перенормировки α_{SIA}^{int} и α_{BIA}^{int} , соответственно.

бические: $F = 0.4 \times 10^5 \text{ В/см}$, $g_{xx} = -0.2785$, $g_{zz} = -0.405$, $g_{xy} = 0.0305$, $d_{xx}/(N + 1/2) = 0.0018 \text{ Тл}^{-1}$, $d_{zz}/(N + 1/2) = 0.0112 \text{ Тл}^{-1}$, $d_{xy}/(N + 1/2) = -0.0022 \text{ Тл}^{-1}$.

Начнем с самых больших компонент тензора g . Сначала обработаем зависимость, которая задается формулой (1.89), откуда найдем $R = -22 \text{ \AA}$. Затем, зная h_1 , вычислим теоретическое значение $d_{zz}/(N + 1/2) = 0.008 \text{ Тл}^{-1}$ и сравним его с экспериментальным. Далее определим комбинацию $\tilde{\chi}R^2$, которая входит в (1.91), (1.92). Теперь можно найти $d_{xx}/(N + 1/2) = 0.0016 \text{ Тл}^{-1}$ по формуле (1.92), а также $\tilde{\chi} = 0.015$. Наконец, обработаем недиагональную компоненту $g_{xy}(0)$ и определим комбинацию $\tilde{\gamma}_cR$ из сравнения (1.93) с экспериментальным значением g_{xy} . Оценим значение $d_{xy}/(N + 1/2)$ по формуле (1.94), используя найденную $\tilde{\gamma}_cR$. Определим $\tilde{\gamma}_c$. Кроме того, оценим значения констант α_{BIA} и α_{SIA} . Полученные результаты представим в виде таблиц (см. Табл.1.1 и Табл.1.2).

Имеющийся в литературе большой разброс экспериментальных данных по спиновым константам может быть связан с неполным учетом ИСОВ. Чаще всего, определяются не объемные параметры (γ_c и a_{SO}), а некие эффективные вели-

	эксп. (Тл ⁻¹)	теор. (Тл ⁻¹)
$d_{zz}/(N + 1/2)$	0.0112	0.0083
$d_{xx}/(N + 1/2)$	0.0018	0.0016
$d_{xy}/(N + 1/2)$	-0.0022	-0.008 ($\gamma_c > 0$) 0.0047 ($\gamma_c < 0$)

Таблица 1.2. Экспериментальные и теоретические значения производных g -фактора по $|B_z|$

чины, содержащие информацию об интерфейсе. Если же γ_c определяется не из α_{BIA} , а из кубичного по импульсу слагаемого Дрессельхауза, который не содержит интерфейсной перенормировки, то эксперимент согласуется с kp -теорией [51].

Аналитическая модель поверхностных состояний в вейлевском полуметалле

Существование на поверхности вейлевских полуметаллов TaAs и NbAs состояний с незамкнутыми ферми-контурами, так называемых ферми-арок, было предсказано в рамках численных расчетов методами функционала электронной плотности [10, 79]. Более того, эти поверхностные состояния (ПС) наблюдались экспериментально сразу несколькими группами [7–10]. Однако до сих пор не было построено простой аналитической модели, которая позволила бы их описать, учитывая только нетривиальную топологию вейлевского полуметалла и резкий обрыв кристаллического потенциала на поверхности образца без привлечения каких-либо дополнительных механизмов, и легко обобщалась на наличие внешних полей. Данная глава посвящена построению такой модели. В разделе (2.1) из общефизических требований получено граничное условие (ГУ) для эффективных волновых функций на поверхности вейлевского полуметалла. ГУ содержит два феноменологических параметра, один из которых описывает внутридолинное, а другой – междолинное взаимодействие за счет атомарно резкого потенциала поверхности. В разделе (2.2) с использованием найденного ГУ проанализированы спектры ПС. В случае отсутствия междолинного взаимодействия ферми-контур ПС представляют собой лучи, исходящие из проекций объемных вейлевских точек. В зависимости от величины внутридолинного граничного параметра эти лучи либо пересекаются, либо нет. В последнем случае учет междолинного взаимодействия с величиной выше порогового значения приводит к смыканию лучей и образованию ферми-арки. В другом случае из-за междолинного взаимодействия лучи рассталкиваются в точке пресечения, также формируя ферми-арку. Лучи, которые не образуют ферми-арку в двухдолинном приближении, могут, однако, связывать удаленные долины зоны Бриллюэна, что

качественно рассмотрено в разделе (2.3) в рамках четырехдолинного приближения.

2.1. Граничное условие для огибающих функций

В этом разделе будет найдено общее ГУ для эффективных волновых функций вейлевского полуметалла в ограниченной области.

Эффективный kr гамильтониан, описывающий объемный спектр с двумя вейлевскими точками, может быть записан в виде

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}(\hat{\mathbf{p}} + \mathbf{p}_0) & \Delta\sigma_x \\ \Delta\sigma_x & -\boldsymbol{\sigma}(\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p}_0) \end{pmatrix}, \quad (2.1)$$

где $\mathbf{p} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$ – оператор импульса, $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ – набор матриц Паули, Δ характеризует объемное междолинное взаимодействие, $\mathbf{p}_0 = (p_0, 0, 0)$ определяет положение вейлевских точек в отсутствие объемного междолинного взаимодействия. Мы полагаем, что вейлевская скорость равна $v = 1$.

В рамках двухдолинного приближения, огибающая функция электрона с энергией E подчиняется уравнению типа Дирака

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}(\hat{\mathbf{p}} + \mathbf{p}_0) & \Delta\sigma_x \\ \Delta\sigma_x & -\boldsymbol{\sigma}(\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p}_0) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi \\ \phi \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi \\ \phi \end{pmatrix}, \quad (2.2)$$

где $\psi = (\psi_1, \psi_2)^T$, $\phi = (\phi_1, \phi_2)^T$ – двухкомпонентные псевдоспиноры.

Для описания ПС гамильтониан (2.1) должен быть дополнен ГУ на поверхности образца. Ранее такой подход успешно применялся для описания ПС в материалах с Дираковским спектром [116], графене [88, 97–101] и топологических изоляторах [117, 118].

Рассмотрим полубесконечную систему ($z > 0$) и запишем искомое ГУ в следующей форме

$$(\psi + i\hat{g}\phi)|_{z=0} = 0, \quad (2.3)$$

где \hat{g} – пока неизвестная матрица. Наша цель – найти матрицу \hat{g} . Первое ограничение на нее получим из требования эрмитовости гамильтониана в ограниченной области, которое эквивалентно занулению компоненты тока, нормальной к границе. Поскольку гамильтониан является самосопряженным оператором, требование эрмитовости $\langle \Phi_\lambda | \hat{H} | \Phi_\nu \rangle = \langle \Phi_\nu | \hat{H} | \Phi_\lambda \rangle^*$, где $\Phi = (\psi^T, \phi^T)^T$ – четырехкомпонентный спинор, должно быть выполнено для всех функций из его области определения. Проинтегрировав по частям выражение $\langle \Phi_\lambda | \hat{H} | \Phi_\nu \rangle$ для произвольных Φ_λ и Φ_ν и используя требование эрмитовости, получаем следующее ограничение на эффективные волновые функции

$$(\psi_\lambda^\dagger \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \psi_\nu - \phi_\lambda^\dagger \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} \phi_\nu)_{z=0} = 0, \quad (2.4)$$

где \mathbf{n} – вектор нормали к поверхности системы.

Комбинируя это с (2.3), получаем $g^\dagger \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n} g = \boldsymbol{\sigma} \mathbf{n}$.

Это ограничение оставляет в матрице g четыре неизвестных параметра. Чтобы уменьшить число неизвестных, мы воспользуемся дополнительными симметричными соображениями.

Как упоминалось во введении, экспериментально подтверждено существование ферми-арок на поверхности (001) материалов без пространственного центра инверсии TaAs и NbAs. При этом кристаллическая решетка в этих материалах симметрична относительно инверсий x на $-x$ и y на $-y$, а экспериментально наблюдаемый спектр обладает симметрией относительно замен p_x на $-p_x$ и p_y на $-p_y$. Причем если рассматривать только две близкие долины, связанные ферми-аркой, то спектр как объемных, так и поверхностных состояний симметричен относительно замен p_x на $-p_x$ или p_y на $-p_y$ в зависимости от расположения долин. С учетом выбора эффективного гамильтониана в форме (2.1), мы рассмотрим ситуацию, когда есть симметрия относительно инверсии x на $-x$. Запишем оператор \hat{I} , отвечающий соответствующему преобразованию в виде

$$\hat{I} = \begin{pmatrix} P_1 & P_2 \\ P_3 & P_4 \end{pmatrix} \hat{i}_{x \rightarrow -x}, \quad (2.5)$$

где P_1, P_2, P_3, P_4 – неизвестные матрицы, $\hat{i}_{x \rightarrow -x}$ – оператор, заменяющий x на $-x$. Поскольку \hat{I} – преобразование симметрии задачи, то оператор \hat{I} должен коммутировать с гамильтонианом, т. е. должно быть выполнено $[\hat{H}, \hat{I}] = 0$, откуда находим $P_1 = P_4 = 0$, $P_2 = P_3 = \sigma_x$.

Граничное условие (2.3) также должно быть симметрично относительно преобразования \hat{I} , откуда получаем еще одно ограничение на матрицу \hat{g} : $\sigma_x g^{-1} \sigma_x = -g$.

Комбинируя эти два условия, находим матрицу \hat{g} :

$$g(\alpha, \gamma) = \frac{i}{\sqrt{\gamma}} \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} & \mp i\sqrt{1-\gamma} \\ \pm i\sqrt{1-\gamma} & e^{i\alpha} \end{pmatrix}, \quad (2.6)$$

где $\alpha \in [0, 2\pi)$ и $\gamma \in (0, 1)$ – два действительных феноменологических параметра, которые зависят как от объемной зонной структуры, так и от микроскопического строения интерфейса. Величины интерфейсных параметров могут быть извлечены из сравнения с экспериментом, как это было сделано при рассмотрении краевых состояний в графене [102]. Переход от ГУ, где матрица \hat{g} взята с верхним знаком, к условию с матрицей \hat{g} с нижним знаком осуществляется сдвижкой α на π . Так как α является свободным параметром, будем далее для определенности рассматривать только верхний знак в \hat{g} .

В предельном случае $\gamma \rightarrow 0$ волновые функции в разных долинах оказываются не связанными, и мы получаем однодолинные ГУ следующего вида

$$(\phi_1 + e^{i(\alpha-\pi/2)}\phi_2)|_{z=0} = 0, \quad (2.7)$$

$$(\psi_1 + e^{-i(\alpha-\pi/2)}\psi_2)|_{z=0} = 0. \quad (2.8)$$

Таким образом, параметр α определяет спектр ПС в отдельных долинах, а параметр γ характеризует величину интерфейсного междолинного взаимодействия: чем сильнее взаимодействие, тем больше γ .

При рассмотрении одной долины ГУ типа (2.7) или (2.8) было получено в работе [119]. Однако в однодолинном приближении параметры ГУ в разных долинах, вообще говоря, различны. Мы показали, что эти параметры связаны. Кроме того, учтено интерфейсное междолинное взаимодействие, которое, как будет показано далее, играет ключевую роль при образовании ферми-арок.

2.2. Электронный спектр полуплоскости

В этом разделе будут рассчитаны спектры ПС на поверхности (001) вейлевского полуметалла. Для этого мы найдем решения уравнения (2.2), дополненного ГУ (2.3) с матрицей g , удовлетворяющей (2.6).

Существуют два механизма междолинного взаимодействия: объемный (описывается Δ) и интерфейсный (характеризуется γ). Объемное междолинное взаимодействие само по себе не приводит к образованию ферми-арок. Чтобы проанализировать влияние резкого (на атомарных масштабах) интерфейсного потенциала, мы пренебрежем Δ . В этом приближении волновые функции ПС в левой и правой долинах, соответственно, имеют вид

$$\psi = C \begin{pmatrix} p_x + p_0 - ip_y \\ E - i\hbar\kappa_+ \end{pmatrix} e^{i(p_x x + p_y y)/\hbar} e^{-\kappa_+ z}, \quad (2.9)$$

$$\phi = C' \begin{pmatrix} p_x - p_0 - ip_y \\ -(E + i\hbar\kappa_-) \end{pmatrix} e^{i(p_x x + p_y y)/\hbar} e^{-\kappa_- z}, \quad (2.10)$$

где $\hbar\kappa_{\pm} = \sqrt{(p_x \pm p_0)^2 + p_y^2 - E^2}$.

Подставив эти решения в ГУ, мы получим комплексное дисперсионное уравнение. Спектр ПС будет определяться одновременным занулением его действительной и мнимой частей

$$\sqrt{1 - \gamma}[E(\hbar\kappa_- - \hbar\kappa_+) + 2p_x p_y] - \cos \alpha[2E p_x + (\hbar\kappa_- - \hbar\kappa_+) p_y] + \\ + \sin \alpha[\hbar\kappa_+(p_x - p_0) + \hbar\kappa_-(p_x + p_0)] = 0, \quad (2.11)$$

$$\sqrt{1 - \gamma}(E^2 + \hbar^2 \kappa_- \kappa_+ - p_x^2 + p_0^2 + p_y^2) - \cos \alpha[2E p_y + \hbar\kappa_+(p_x - p_0) - \hbar\kappa_-(p_x + p_0)] + \\ + \sin \alpha[2E p_0 + (\hbar\kappa_+ + \hbar\kappa_-) p_y] = 0. \quad (2.12)$$

Для сравнения результатов с данными по фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением более удобно анализировать не спектр, а ферми-контура ПС при различных энергиях. Сначала рассмотрим подробно случай нулевой энергии $E = 0$. При этом оказывается удобным ввести эллиптические координаты

$$p_x = p_0 \cosh u \cos v, \quad p_y = p_0 \sinh u \sin v. \quad (2.13)$$

Система (2.11)-(2.12) в этих координатах эквивалентна одному уравнению

$$\sqrt{1 - \gamma} \cosh u \sin v + \cos \alpha \sin v + \sin \alpha \sinh u = 0, \quad (2.14)$$

которое задает связь параметров u и v .

Если $\gamma = 0$, что соответствует отсутствию междолинного взаимодействия, то ферми-контура ПС описывается уравнением

$$p_y = \begin{cases} -\tan \alpha (p_x - p_0), & (p_x - p_0) \cos \alpha \geq 0 \\ \tan \alpha (p_x + p_0), & (p_x + p_0) \cos \alpha \leq 0. \end{cases} \quad (2.15)$$

На плоскости (p_x, p_y) ферми-поверхности в отсутствие междолинного взаимодействия представляют собой лучи, исходящие из проекций объемных вейлевских точек, взаимная ориентация которых зависит от внутридолинного параметра α (см. Рис. 2.1). Если $\cos \alpha \geq 0$, то эти лучи уходят на бесконечность без пересечений, а если $\cos \alpha < 0$ ($\alpha \neq \pi$) – имеют одну точку пересечения при

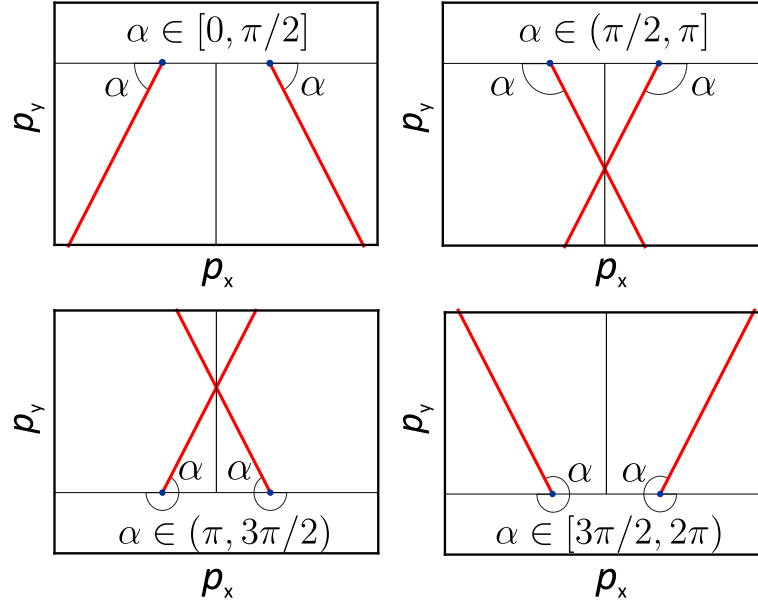


Рис. 2.1. Схематическое изображение ферми-контуров поверхностных состояний при $E = 0$ в отсутствие междолинного взаимодействия ($\gamma = 0$) для различных внутридолинных граничных параметров α . Синие кружки показывают положение проекций объемных вейлевских точек.

$p_x = 0$. При $\alpha = \pi$ ферми-поверхности занимают всю ось $p_y = 0$, что можно трактовать как суперпозицию независимых лучей от левой и правой долин, которые уходят вправо и влево, соответственно. Далее будет показано, что учет интерфейсного междолинного взаимодействия приводит к образованию ферми-арок.

При учете междолинного взаимодействия, ферми-поверхности могут быть заданы параметрически. Если $\sqrt{1 - \gamma} \cosh u + \cos \alpha \neq 0$, то параметр v выражается через u из (2.14)

$$v_1 = \arcsin \left[-\frac{\sin \alpha \sinh u}{\sqrt{1 - \gamma} \cosh u + \cos \alpha} \right], \quad (2.16)$$

$$v_2 = \pi - \arcsin \left[-\frac{\sin \alpha \sinh u}{\sqrt{1 - \gamma} \cosh u + \cos \alpha} \right]. \quad (2.17)$$

При $\alpha \neq \pi$, $\sqrt{1 - \gamma} \neq -\cos \alpha$ все решения задаются (2.13), где v определяется из (2.16), (2.17), а u – параметр.

При $\alpha = \pi$, помимо решений с v из (2.16), (2.17), есть дополнительное

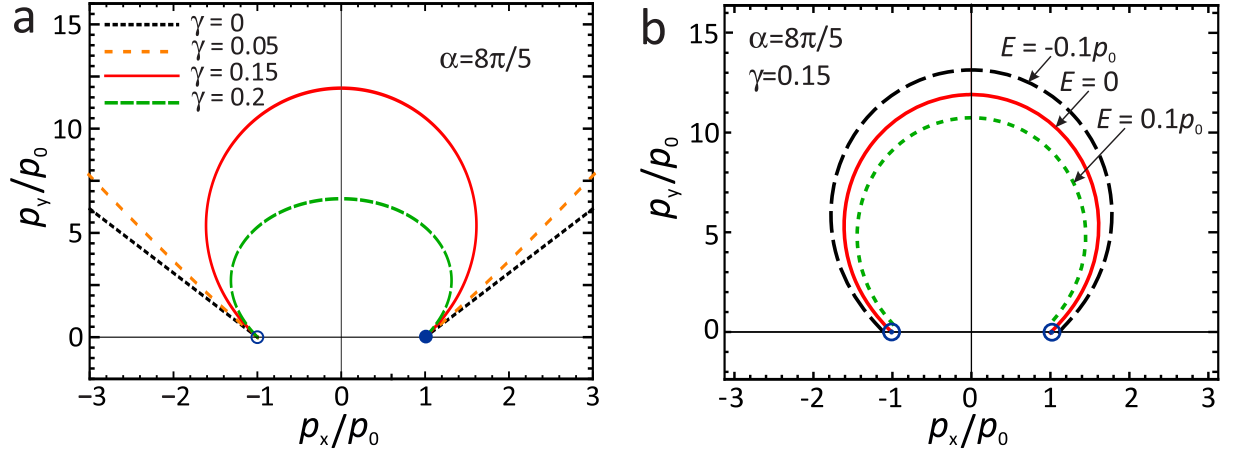


Рис. 2.2. а) Зависимость формы ферми-контуров поверхностных состояний при $E = 0$ на поверхности (001) вейлевского полуметалла от силы интерфейсного междолинного взаимодействия γ при фиксированном внутридолинном граничном параметре α , который отвечает непересекающимся лучам в пределе $\gamma = 0$ (см. Рис.2.1). Синие кружки показывают положение объемных вейлевских точек с учетом киральности. б) Модификация ферми-арок при изменении энергии. Здесь синие кружки это проекции объемных вейлевских конусов и точек.

решение

$$p_x = \frac{p_0}{\sqrt{1-\gamma}} \cos v, \quad p_y = p_0 \sqrt{\frac{\gamma}{1-\gamma}} \sin v, \quad v \in [0, 2\pi), \quad (2.18)$$

а при $\sqrt{1-\gamma} = -\cos \alpha$ – дополнительное решение

$$p_x = p_0 \cos v, \quad p_y = 0, \quad v \in [0, 2\pi). \quad (2.19)$$

Ферми-контуров представлены на Рис. 2.2а и 2.3а. На Рис. 2.2а внутридолинный граничный параметр α отвечает случаю, когда в отсутствие интерфейсного междолинного взаимодействия ($\gamma = 0$) лучи не пересекаются ($\cos \alpha \geq 0$). Далее показано, как меняется форма ферми-поверхностей с ростом междолинного взаимодействия γ . Лучи будут замыкаться, образуя ферми-арку, при $\gamma > \cos^2 \alpha$. Ферми-поверхности в виде арок подобной формы недавно наблюдались экспериментально в вейлевских полуметаллах TaAs [7–9] и NbAs [10]. Ферми-поверхности будут иметь качественно такой же вид для всех α из четвертого квадранта. Для параметров α из первого квадранта картинка будет перевернутой.

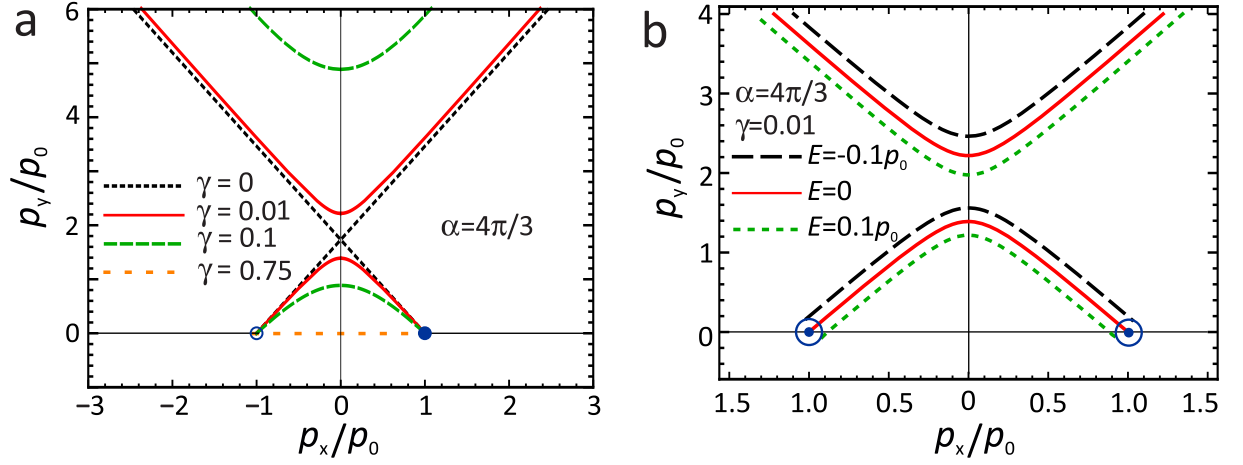


Рис. 2.3. а) Ферми-контура поверхностных состояний при $E = 0$ на поверхности (001) вейлевского полуметалла в зависимости от параметра междолинного взаимодействия γ при фиксированном α , для которого ферми-лучи имеют точку пересечения в пределе $\gamma = 0$. б) Эволюция ферми-контуров при изменении энергии E .

При $\alpha = \pi/2, 3\pi/2$ лучи будут замыкаться сразу, а при $\alpha = 0$ междолинное взаимодействие не влияет на форму ферми-поверхностей.

На Рис. 2.3а параметр α принадлежит третьему квадранту и при $\gamma = 0$ лучи пересекаются при $p_x = 0$. Учет сколь угодно слабого междолинного взаимодействия приводит к рассталкиванию лучей. При этом образуется две ветви. Одна из них представляет собой ферми-арку, поскольку связывает проекции объемных вейлевских точек, а вторая незамкнута и не проходит через вейлевские точки. Для параметра α сдвинутого на π картинка будет перевернутой.

Как упоминалось выше, граничные параметры могут быть извлечены из сравнения с экспериментальными данными. Сравнивая уравнения (2.13)–(2.14) с данными, представленными на Рис. 3б работы [9], где две ферми-арки связывают две пары долин, можно получить следующие значения граничных параметров: $\alpha \approx 5.64$ рад, $\gamma \approx 0.88$ для большой ферми-арки; $\alpha \approx 5$ рад, $\gamma \approx 0.44$ для меньшей.

При ненулевой энергии ферми-поверхности могут быть получены из совместного решения уравнений (2.11) и (2.12). На Рис. 2.2б представлены ферми-контура при различных энергиях для граничного параметра α из четвертого

квадранта и γ , соответствующего поверхностным состояниям типа ферми-арок. Такая зависимость формы ферми-арок от энергии соответствует недавним экспериментальным наблюдениям [7]. Для параметра α из первого квадранта размер ферми-арок будет увеличиваться с ростом энергии. На Рис. 2.3б представлена аналогичная зависимость формы Ферми арок от энергии для параметра α из третьего квадранта.

2.3. Электронный спектр полуплоскости в четырехдолинном приближении

В рамках рассмотренного двухдолинного приближения помимо ферми-поверхностей в виде арок существуют ферми-контур, представляющие собой лучи, исходящие из одной вейлевской точки, но не заканчивающиеся в другой. Решения, которые не образуют ферми-арку, связывающую две близкие долины также появляются и в численных расчетах [79, 120]. В рассматриваемой модели такие решения возникли, поскольку были учтены только две вейлевские точки, расположенные вблизи центра зоны Бриллюэна. В реальных материалах вейлевских точек больше и они расположены вблизи краев зоны Бриллюэна [7–10, 120]. Луч, начинающийся в одной из рассматриваемых вейлевских точек может, например, заканчиваться в вейлевской точке на другом краю зоны Бриллюэна. Чтобы качественно продемонстрировать такую возможность, рассмотрим модель с двумя парами вейлевских точек, расположенных вблизи противоположных краев зоны Бриллюэна

$$\hat{H} = \begin{pmatrix} \sigma(\hat{\mathbf{p}} + \mathbf{p}_1) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\sigma(\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p}_2) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\sigma(\hat{\mathbf{p}} + \mathbf{p}_2) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \sigma(\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p}_1) \end{pmatrix}, \quad (2.20)$$

где $\mathbf{p}_1 = (p_{0x}, -p_{0y}, 0)$, $\mathbf{p}_2 = (p_{0x}, p_{0y}, 0)$, $p_{0x} \ll p_{0y}$.

Система обладает симметрией по отношению к преобразованиям инверсии $x \rightarrow -x$ и $y \rightarrow -y$, соответствующие операторы имеют вид

$$\hat{I}_x = \begin{pmatrix} I_1 & 0 \\ 0 & I_1 \end{pmatrix} \hat{i}_{x \rightarrow -x}, \quad I_1 = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_x \\ \sigma_x & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.21)$$

$$\hat{I}_y = \begin{pmatrix} 0 & I_2 \\ I_2 & 0 \end{pmatrix} \hat{i}_{y \rightarrow -y}, \quad I_2 = \begin{pmatrix} \sigma_y & 0 \\ 0 & \sigma_y \end{pmatrix}. \quad (2.22)$$

Ввиду выполнения соотношения $p_{0x} \ll p_{0y}$, будем полагать, что ГУ замешивает огибающие функции каждой пары долин, но не замешивает функции разных пар, т. е.

$$(\psi + i\hat{g}_1\phi)|_{z=0} = 0, \quad (\psi' + i\hat{g}_2\phi')|_{z=0} = 0, \quad (2.23)$$

где ψ, ϕ, ψ', ϕ' двухкомпонентные спиноры, отвечающие долинам с вейлевскими точками, расположенными в точках $-\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, -\mathbf{p}_2, \mathbf{p}_1$ зоны Бриллюэна, соответственно.

Из требования эрмитовости гамильтониана на полупростанстве и симметрии по отношению к инверсии $x \rightarrow -x$ следует: $g_1 = g(\alpha, \gamma), g_2 = g(\alpha', \gamma')$. Связь параметров ГУ может быть получена из симметрии по отношению к преобразованию y на $-y$: $\alpha' = -\alpha, \gamma' = \gamma$. Таким образом, если в верхней паре долин ферми-поверхности при $E = 0$ имеют вид как на Рис. 2.2 или Рис. 2.3, то в нижней паре долин они будут перевернуты.

Возможные варианты взаимного расположения ферми поверхностей показаны на Рис. 2.4. Стоит отметить, что kr -приближение, строго говоря, применимо только вблизи вейлевских точек и представленные на Рис. 2.4 ферми-контур во всей зоне Бриллюэна имеют схематический характер.

В зависимости от положения вейлевских точек в зоне Бриллюэна и величины граничных параметров возможны различные варианты взаимодействия лучей, которые в двухдолинном приближении не образуют ферми-арку. Например, на панели а Рис. 2.4 возможны следующие возможности: 1) лучи каждой

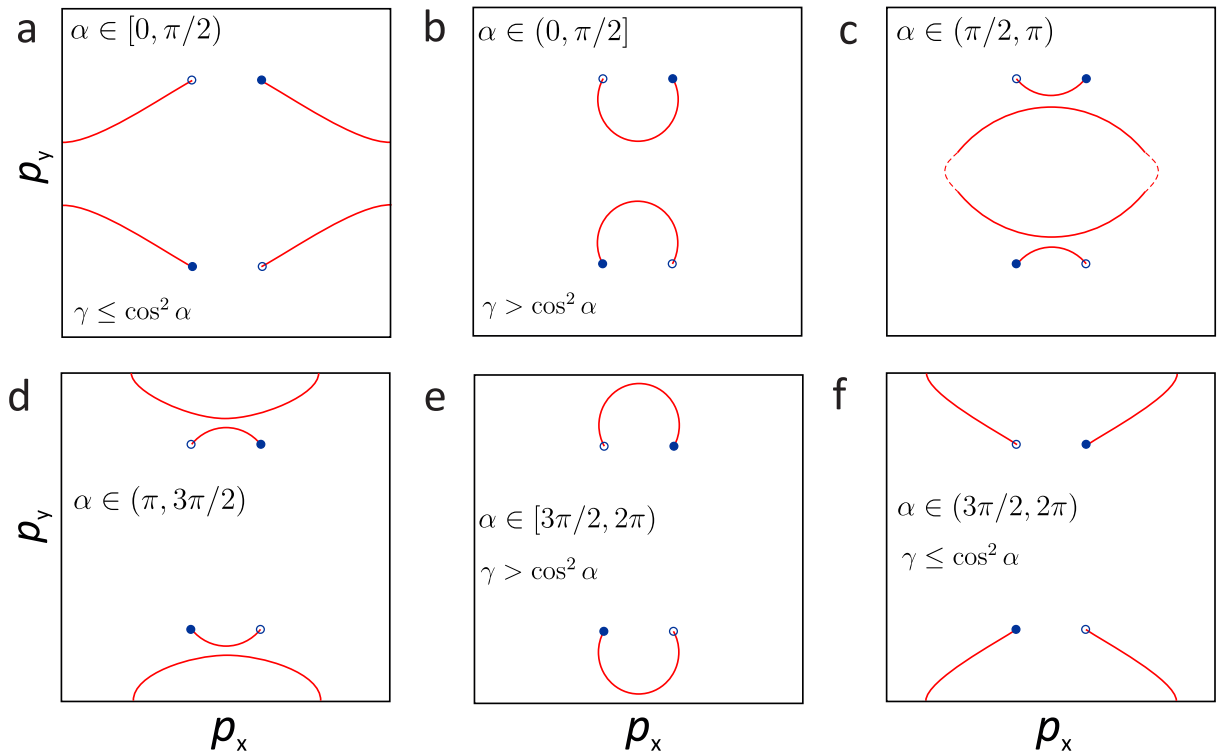


Рис. 2.4. Схематическое изображение взаимного расположения ферми-контуров при $E = 0$ в четырехдолинном приближении.

пары близких долин доходят до боковых краев зоны Бриллюэна, таким образом замыкаясь друг с другом; 2) лучи верхней пары долин искривляются вдали от Вейлевских точек и доходят до верхнего края зоны Бриллюэна, а нижней пары – до нижнего, таким образом, будут замыкаться лучи из разных пар; 3) луч из верхней пары будет взаимодействовать с лучом из нижней пары в пределах зоны Бриллюэна. Аналогично можно рассмотреть варианты для панели f Рис. 2.4.

Если α принадлежит второму или третьему квадранту, то одна из ветвей представляет собой незамкнутую кривую, не проходящую через проекции вейлевских точек. Подобные кривые из разных пар долин также могут взаимодействовать различными способами. При этом образуется замкнутая кривая, не проходящая через проекции вейлевских точек и не образующая ферми-арку. Такие кривые также не противоречат топологии и показывают, как вейлевские точки могут аннигилировать при переходе от тривиального к топологическому

изолятору [79].

Интерфейсные эффекты для графеновой антиточки

Данная глава посвящена изучению интерфейсных эффектов для антиточки в графене. В разделе 3.1 рассмотрено влияние слабой неоднородности линейного края на спектр краевых состояний (КС). В разделе 3.2 вычисляются особенности локальной плотности состояний вблизи антиточки, на которой существуют КС с конечным временем жизни. Раздел 3.3 посвящен заряженной антиточке, в нем рассчитана перенормировка спектра КС под влиянием заряда и транспортное сечение рассеяния электронов на таком наноотверстии.

3.1. Время жизни краевых состояний на полуплоскости графена с шероховатым краем

Как было показано во введении, на трансляционно-инвариантном линейном краю графена существуют КС. Однако особенность зонной структуры графена состоит в том, что КС всегда сосуществуют с объемными состояниями. Это означает, что любое отклонение края от линейного будет приводить к конечному времени жизни КС из-за возможности распада в объем. Один из возможных механизмов распада – шероховатость края. В этом разделе будет оценено время жизни КС на шероховатом линейном краю графена и показано, что даже на линейном краю КС квазистационарны.

Рассматривается шероховатый линейный край, который описывается ГУ (11), определенном на кривой $x = \delta x(y)$, где $\delta x(y)$ – случайное отклонение края от его среднего положения $\langle \delta x \rangle = 0$ в точке y . Шероховатость края предполагается плавной, а $\delta x(y)$ имеет гауссову корреляционную функцию $\langle \delta x(y_1) \delta x(y_2) \rangle = \Delta^2 \exp[-(y_1 - y_2)^2 / l_c^2]$ [121]. Длина волны электрона предполагается много больше

корреляционной длины l_c .

Рассмотрим некую конкретную реализацию границы $x = \delta x(y)$. С помощью преобразования координат $x' = x - \delta x(y)$, $y' = y$ задачу с гамильтонианом (10) и ГУ $(\psi_1 + ia\psi_2)|_{x=\delta x(y)} = 0$ можно свести к задаче со стандартным ГУ $(\psi_1 + ia\psi_2)|_{x=0} = 0$ (штрихи опущены для краткости) и преобразованным гамильтонианом, содержащим дополнительное слагаемое

$$\delta\hat{H} = -v \frac{\partial \delta x(y)}{\partial y} \sigma_y \hat{p}_x. \quad (3.1)$$

Вероятность перехода из КС с импульсом $\hbar k_y$, волновой функцией ψ_s и энергией E_s (для определенности рассмотрим долину с $s = +1$) в объемное состояние с волновой функцией ψ_b и энергией $E_b = \pm v \hbar k'$ из-за шероховатости границы может быть рассчитана по золотому правилу Ферми

$$dw = \frac{2\pi}{\hbar} |\langle \psi_s | \delta\hat{H} | \psi_b \rangle|^2 \delta(E_b - E_s), \quad (3.2)$$

где

$$\psi_s = \sqrt{\frac{2a^2(1-a^2)}{L_y(1+a^2)^2}} k_y \begin{pmatrix} 1 \\ ia^{-1} \end{pmatrix} e^{-\frac{1-a^2}{1+a^2} k_y x} e^{ik_y y}, \quad (3.3)$$

$$\psi_b = \frac{1}{\sqrt{2L_x L_y}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm e^{i\phi_{k'}} \end{pmatrix} e^{ik'_x x} e^{ik'_y y}. \quad (3.4)$$

Для простоты мы пренебрегли вторым объемным решением $\sim e^{-ik'_x x}$, поскольку оно не влияет на конечный результат.

Вероятность распада КС для данной реализации границы получается интегрированием по \mathbf{k}'

$$w = \frac{2v}{\pi L_y} \frac{a^2 |1-a^2|^3 k_y^2}{(1+a^2)^3 \text{sgn}[a]} \times \int_0^{2\pi} d\phi \left(\frac{1+a^2}{2a} + 2 \text{sgn}[a] \sin \phi \right) \frac{|F(k_y - \frac{2|a|}{1+a^2} k_y \sin \phi)|^2}{(1-a^2)^2 + 4a^2 \cos^2 \phi}, \quad (3.5)$$

где

$$F(k) = \int_{-\infty}^{\infty} e^{iky} \frac{\partial \delta x(y)}{\partial y} dy. \quad (3.6)$$

Далее необходимо усреднить w по всем возможным реализациям границы, используя соотношение

$$\langle |F(k)|^2 \rangle = l_c \Delta^2 L_y k^2 e^{-l^2 k^2 / 4}. \quad (3.7)$$

В результате такого усреднения получим

$$\begin{aligned} \langle w \rangle = & \frac{2vl_c \Delta^2 a^2 |1 - a^2|^3}{\pi(1 + a^2)^3 \text{sgn}[a]} k_y^2 \int_0^{2\pi} d\phi \left(\frac{1 + a^2}{2a} + 2\text{sgn}[a] \sin \phi \right) \times \\ & \times \frac{(k_y - \frac{2|a|}{1+a^2} k_y \sin \phi)^2}{(1 - a^2)^2 + 4a^2 \cos^2 \phi} \exp \left[-\frac{l_c^2}{4} \left(k_y - \frac{2|a|}{1 + a^2} k_y \sin \phi \right)^2 \right]. \end{aligned} \quad (3.8)$$

В предельном случае $a \ll 1$ выражение (3.8) приобретает простой вид

$$\langle w \rangle = vl_c \Delta^2 |a| k_y^4 e^{-l_c^2 k_y^2 / 4} \propto k_y^4. \quad (3.9)$$

Таким образом, для малых волновых векторов k_y вероятность распада КС за счет шероховатости линейного края можно оценить как

$$\langle w \rangle \propto k_y^4, \quad (3.10)$$

что означает, что КС квазистационарны.

Можно ожидать, что любое отклонение края от линейности приводит к конечности времени жизни КС. В частности, как было показано во введении, квазистационарные КС существуют на антиточке в графене.

3.2. Локальная плотность состояний вблизи антиточки

Квазистационарные КС, локализованные на антиточке в графене, могут проявляться в зависимости транспортного сечения рассеяния от энергии налетающего электрона [13] и, следовательно, могут быть экспериментально обнаружены при измерении проводимости листа графена с такими нанотверстиями

как функции напряжения на затворе [122]. Однако для таких измерений требуется, чтобы наноотверстия обладали высокой степенью идентичности. Кроме того, другие типы рассеивателей могут "замаскировать" эффект. Другой возможный способ задетектировать КС, свободный от этих недостатков, заключается в измерении локальной плотности состояний вблизи единичной антиточки. В этом разделе будет рассчитана локальная плотность состояний вблизи антиточки и проанализированы ее особенности.

Волновая функция КС с полным угловым моментом j имеет вид

$$\psi_{k,l} = A_l(k)e^{il\varphi} \begin{pmatrix} J_l(kr) + B_l(k)Y_l(kr) \\ -ie^{i\varphi} [J_{l+1}(kr) + B_l(k)Y_{l+1}(kr)] \end{pmatrix}, \quad (3.11)$$

где $k = |E|/(\hbar v)$ – волновой вектор, $J_l(x)$, $Y_l(x)$ –функции Бесселя первого и второго рода, соответственно, $A_l(k)$ нормировочный множитель, а $B_l(k)$ можно получить, подставляя волновую функцию в ГУ (11):

$$B_l(k) = -\frac{aJ_{l+1}(kR) + J_l(kR)}{Y_l(kR) + aY_{l+1}(kR)}. \quad (3.12)$$

Чтобы определить $A_l(k)$, мы используем правило нормировки волновых функций непрерывного спектра $\int_R^\infty \psi_{k',j'}^+(r, \varphi)\psi_{k,j}(r, \varphi)d^2r = g\delta(k - k')\delta_{jj'}$, где g – безразмерный параметр, который может быть определен из свободной (без антиточки) плотности состояний в расчете на единицу площади.

Локальная плотность состояний, включающая спиновое и долинное вырождение, определяется выражением

$$\rho(k, r) = \frac{k}{\pi\hbar v} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{1}{1 + |B_l(k)|^2} \left[|J_l(kr) + B_l(k)Y_l(kr)|^2 + |J_{l+1}(kr) + B_l(k)Y_{l+1}(kr)|^2 \right], \quad (3.13)$$

ее зависимость от энергии показана на Рис. 3.1. Эта зависимость имеет резонансный характер, причем положение резонансов почти эквидистантно в соответствии со спектром КС, а ширина определяется их временем жизни.

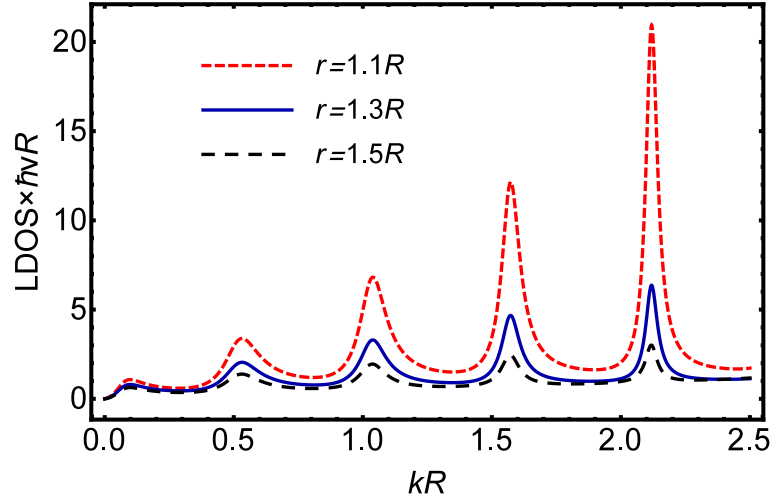


Рис. 3.1. Зависимость локальной плотности состояний на различных расстояниях r от центра круглого нанотверстия радиусом R от энергии электрона ($k = |E|/\hbar v$) для постоянного граничного параметра $a = -0.3$. Из-за наличия квазистационарных краевых состояний, локализованных на антиточке, на фоне плотности состояний свободных частиц $2k/(\pi\hbar v)$ появляются резонансные пики.

При $kR \rightarrow 0$ все коэффициенты $C_l \rightarrow 0$ и мы получаем свободную плотность состояний в расчете на единицу площади $\rho_{free}(k) = 2k/(\pi\hbar v)$.

Проанализируем особенности локальной плотности состояний. Для энергий меньших, чем энергия основного состояний ($k < k_0$), $a \ll 1$ и $r \sim R$ главный вклад в локальную плотность состояний дают члены с $l = 0, -1$ ($j = \pm 1/2$) и мы имеем

$$\rho(k, r) \simeq \rho_{free}(k) \left(1 + \frac{R^2}{2a^2 r^2} \right). \quad (3.14)$$

Полученная локальная плотность состояний существенно больше плотности состояний для свободных частиц, причем она растет при уменьшении параметра a и расходится при $a \rightarrow 0$, что характерно для края типа зигзаг. Для линейного края типа рекзаг, локальная плотность состояний демонстрирует качественно такое же поведение [88].

Если энергия близка к энергии основного состояния $k \simeq k_0$, то высота соответствующего пика

$$\rho(k_0, r) \simeq \frac{2\rho_{free}(k)}{(\pi k_0 r)^2}. \quad (3.15)$$

Вблизи КС с угловым моментом l_0 ($kR \simeq 2|a|l_0 \ll 1$) коэффициент B_{l_0} резонансно велик, в то время как все остальные B_l малы. Таким образом, высота l_0 -ого пика в плотности состояний имеет вид

$$\rho \simeq \frac{\rho_{free}(k)}{\pi^2 k R} \frac{l_0!^2}{(|a|l_0)^{2l_0+1}} \left(\frac{R}{r}\right)^{2l_0+2}. \quad (3.16)$$

В соответствии с уравнениями (3.15, 3.16) высота всех резонансов как функция расстояния уменьшается по степенному закону при удалении от антиточки. При этом чем больше номер резонанса l_0 , тем сильнее пространственный спад локальной плотности состояний. При фиксированном расстоянии от антиточки каждый следующий по энергии пик выше, чем предыдущий. Такое поведение резонансов в локальной плотности состояний, полученное в низкоэнергетическом пределе $kR \ll 1$, качественно согласуется с результатами для более широкого диапазона энергий, показанными на Рис. 3.1.

Пространственная зависимость локальной плотности состояний при любых энергиях демонстрирует спадание по степенному закону на малых расстояниях и фриделевские осцилляции вдали от антиточки без каких либо резонансов.

3.3. Спектр краевых состояний и сечение рассеяния на заряженной антиточке

Этот раздел посвящен КС на заряженной антиточке. Заряд может возникнуть естественным образом, например, если графен находится на подложке с большим количеством заряженных примесей [123], или быть создан искусственно, например, с помощью димеров [124]. Также антиточка может заряжаться, если электроны будут заполнять уровни КС. В данном разделе будет вычислена перенормировка спектра КС из-за кулоновских эффектов, а также сечение рассеяния на заряженной антиточке.

Наличие заряда Q в центре антиточки приводит к дополнительному кулоновскому члену $-eQ/r$ в уравнении Вейля-Дирака (10). Край антиточки по-

прежнему описывается ГУ (11) с постоянным граничным параметром a .

В полярной системе координат уравнение Вейля-Дирака с кулоновским потенциалом может быть представлено в виде

$$\begin{pmatrix} 0 & -ie^{-i\varphi}\partial_r - \frac{e^{-i\varphi}}{r}\partial_\varphi \\ -ie^{i\varphi}\partial_r + \frac{e^{i\varphi}}{r}\partial_\varphi & 0 \end{pmatrix} \psi = \left(-k + \frac{q}{r}\right) \psi, \quad (3.17)$$

где $q = eQ/\hbar v$ — безразмерный заряд. Для отрицательных энергий $E < 0$, следуя работам [91, 125], мы ищем решение с полным угловым моментом $j = l + 1/2$ в виде

$$\psi^{(l)}(r, \varphi) = \begin{pmatrix} \phi(r) + \chi(r) \\ (\phi(r) - \chi(r))e^{i\varphi} \end{pmatrix} r^{s-\frac{1}{2}} e^{il\varphi} e^{ikr}, \quad (3.18)$$

где $s = \sqrt{(l + \frac{1}{2})^2 + q^2}$.

Функции $\phi(r)$ и $\chi(r)$ определяются следующими выражениями

$$\chi(r) = AM(s + iq, 2s + 1, -2ikr) + BU(s + iq, 2s + 1, -2ikr), \quad (3.19)$$

$$\begin{aligned} \phi(r) = \frac{A(s + iq)}{(l + \frac{1}{2})} M(s + iq + 1, 2s + 1, -2ikr) - \\ - B \left(l + \frac{1}{2}\right) U(s + iq + 1, 2s + 1, -2ikr), \end{aligned} \quad (3.20)$$

где $M(a, b, z)$ и $U(a, b, z)$ — вырожденные гипергеометрические функции первого и второго рода, соответственно. Коэффициенты A и B связаны ГУ

$$\frac{B}{A} = \frac{(1 - ia) \left[\left(\frac{s+iq}{l+\frac{1}{2}}\right) M(s + iq + 1, 2s + 1, -2ikR_0) + M(s + iq, 2s + 1, -2ikR_0) \right]}{(1 + ia)(l + \frac{1}{2})U(s + iq, 2s + 1, -2ikR_0) - (1 - ia)U(s + iq + 1, 2s + 1, -2ikR_0)}. \quad (3.21)$$

Для того, чтобы определить спектр КС, мы зануляем амплитуду падающей волны и получаем следующее дисперсионное уравнение:

$$\begin{aligned} & \left[(1+ia) \left(\frac{s+iq}{l+1/2} \right) M(s+iq+1, 2s+1, z) + (1-ia) M(s+iq, 2s+1, z) \right] + \\ & + \left[(1+ia)(l+1/2)U(s+iq+1, 2s+1, z) - (1-ia)U(s+iq, 2s+1, z) \right] \\ & \times \left[\frac{\Gamma(2s+1)e^{i\pi(-s-iq)}}{\Gamma(s-iq+1)} \right] = 0. \end{aligned} \quad (3.22)$$

В низкоэнергетическом пределе ($kR \ll 1$) и при условиях $|q| \ll 1$, $la < 0$ спектр КС с $l \neq 0$ определяется выражением

$$kR \simeq -2al + \frac{l}{l+1/2}q + i \frac{|\Gamma(l+1/2-iq)|^2}{8l\Gamma^2(2l)} e^{-\pi q} \left(-4al + \frac{2l}{l+1/2}q \right)^{2l+1}. \quad (3.23)$$

При $l = 0$ действительная часть k определяется как

$$kR \simeq k_0R - \frac{q}{1+a/k_0R}, \quad (3.24)$$

где k_0 – решение уравнения (18).

В соответствии с уравнениями (3.23, 3.24), волновой вектор k квазистационарных КС уменьшается (увеличивается) для отрицательно (положительно) заряженной антиточки при увеличении абсолютного значения заряда. В то же время, энергия КС увеличивается (уменьшается), так как $E = -\hbar vk$. Этот результат интуитивно понятен, поскольку отрицательно (положительно) заряженная антиточка отталкивает (притягивает) электроны, и поэтому энергия КС растет (уменьшается).

Далее мы перейдем к решению задачи рассеяния. Сечение рассеяния σ_{tr} может быть выражено через фазы рассеяния δ_l

$$\sigma_{tr} = \frac{2}{k} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \sin^2(\delta_l - \delta_{l+1}), \quad (3.25)$$

где последние определены стандартным образом

$$\frac{\chi}{\phi} \Big|_{r \rightarrow \infty} = \exp \left[2ikr + 2i\beta \ln(2kr) - \pi i \left(l + \frac{1}{2} \right) + 2i\delta_l(k) \right]. \quad (3.26)$$

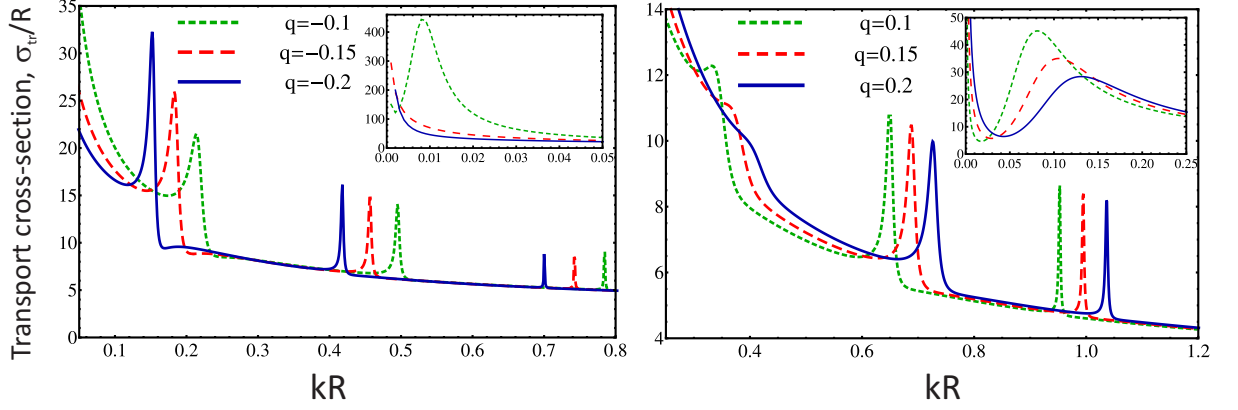


Рис. 3.2. Зависимость транспортного сечения рассеяния σ_{tr} от энергии при рассеянии на положительно (правая панель, $q > 0$) и отрицательно (левая панель, $q < 0$) заряженной антиточке при $a = -0.15$. С ростом $|q|$ резонансные пики, положение которых определяется спектром КС, смещаются вправо для положительного заряда и влево, если заряд отрицательный, в соответствии с уравнениями (3.23,3.24). Ширина резонансов зависит от времени жизни краевых состояний и уменьшается, если антиточка заряжена отрицательно.

Чтобы найти фазы рассеяния, запишем решения для $\chi(r)$ и $\phi(r)$ в пределе $r \rightarrow \infty$

$$\chi(r) \sim A \frac{\Gamma(2s+1)}{\Gamma(s-iq+1)} e^{i\frac{\pi}{2}(s+iq)} (2kr)^{-s} e^{-iq \ln(2kr)} + B e^{-i\frac{\pi}{2}(s+iq)} (2kr)^{-s} e^{-iq \ln(2kr)}, \quad (3.27)$$

$$\phi(r) \sim \frac{A(s+iq)\Gamma(2s+1)}{(l+\frac{1}{2})\Gamma(s+iq+1)} e^{i\frac{\pi}{2}(s-iq)-2ikr+iq \ln(2kr)} (2kr)^{-s}. \quad (3.28)$$

Сравнивая (3.26) с (3.27) и (3.28), находим

$$e^{2i\delta_l(k)} = \left(\frac{l+\frac{1}{2}}{s+iq} \right) \frac{\Gamma(s+iq+1)}{\Gamma(s-iq+1)} e^{i\pi(l+\frac{1}{2}-s)} + \frac{B}{A} \left(\frac{l+\frac{1}{2}}{s+iq} \right) \frac{\Gamma(s+iq+1)}{\Gamma(2s+1)} e^{i\pi(l+\frac{1}{2}+iq)}. \quad (3.29)$$

На зависимости сечения рассеяния от энергии (см. Рис. 3.2), появляются характерные пики, соответствующие рассеянию на квазистационарных КС, локализованных на антиточке, аналогично случаю незаряженного нанотверстия.

Для отрицательно (положительно) заряженной антиточки эти пики сдвигаются влево (вправо) при увеличении абсолютного значения заряда в соответствии с перенормировкой спектра КС, которая обсуждалась выше. Ширина пиков, определяемая мнимой частью энергии, также находится в качественном согласии с (3.23): при отрицательных q мнимая часть энергии уменьшается с ростом $|q|$ и пики становятся уже, что соответствует более стационарным состояниям; для положительных q мнимая часть энергии растет при увеличении $|q|$ и пики становятся шире.

Заключение

Основные результаты работы заключаются в следующем:

1. Получено граничное условие, которое описывает атомарно резкую гетерограницу типа GaAs/ AlGaAs с большим разрывом зоны проводимости, отсутствие центра инверсии в объемном кристалле, спин-орбитальное взаимодействие в объеме и на интерфейсе симметрии C_{2v} .
2. Проанализировано влияние атомарно резкого и непроницаемого интерфейса на спиновое расщепление спектра двумерных электронов в несимметричных гетероструктурах на основе соединений $(001) A_3B_5$ в отсутствие магнитного поля. Показано, что спиновый гамильтониан по-прежнему представляет собой сумму термов Дрессельхауза и Бычкова-Рашбы, однако соответствующие константы перенормированы за счет интерфейсного спин-орбитального взаимодействия. Из сравнения с экспериментом оценены величины интерфейсных перенормировок и показано, что они существенны. Имеющийся в литературе большой разброс экспериментальных данных по спиновым константам связывается с неполным учетом интерфейсного спин-орбитального взаимодействия.
3. Вычислено спиновое расщепление электронных уровней Ландау на гетеропереходе типа GaAs/ AlGaAs с атомарно резким гетероинтерфейсом. Показано, что интерфейсное спин-орбитальное взаимодействие не только значительно перенормирует компоненты тензора g -фактора, но и приводит к качественным изменениям в их зависимости от квантующей компоненты магнитного поля. Результаты качественно и количественно описывают экспериментальные данные по электронному парамагнитному резонансу в системе двумерных электронов, прижатых внутренним электрическим полем к одной гетерогранице в широкой квантовой яме GaAs/AlGaAs.
4. Получено общее граничное условие для эффективных волновых функций на поверхности вейлевского полуметалла в двухдолинном приближении.

Оно содержит два действительных феноменологических параметра. Один из них описывает внутридолинное, а другой – междолинное интерфейсное взаимодействие.

5. Рассчитаны спектры поверхностных состояний в вейлевском полуметалле в двухдолинном приближении. Показано, что форма поверхностных состояний определяется соотношением между внутридолинным и междолинным интерфейсными параметрами. Продемонстрирована ключевая роль интерфейсного междолинного взаимодействия в образовании ферми-арок, которые недавно наблюдались экспериментально.
6. Качественно проанализировано взаимодействие между парами долин в вейлевском полуметалле в четырехдолинном приближении. Показано, что в зависимости от величины и соотношения между внутридолинным и междолинным интерфейсным взаимодействием, ферми-арка может соединять две близкие или удаленные точки зоны Бриллюэна.
7. Рассчитаны особенности локальной плотности состояний, отвечающие краевым состояниям на антиточке в графене.
8. Вычислены энергетический спектр краевых состояний и сечение рассеяния электронов на заряженной антиточке в графене. Показано, что энергия краевых состояний увеличивается (уменьшается) при отрицательном (положительном) заряде антиточки. Исследовано, как изменяются положение и форма резонансов в зависимости сечении рассеяния от энергии при изменении заряда антиточки.

Список сокращений и условных обозначений

ГУ — граничное условие

ОФ — огибающие функции

2D — двумерный

3D — трехмерный

КЯ — квантовая яма

СОВ — спин-орбитальное взаимодействие

ИСОВ — интерфейсное спин-орбитальное взаимодействие

КС — краевые состояния

ПС — поверхностные состояния

Список литературы

1. Koralek J., Weber C., Orenstein J. et al. Emergence of the persistent spin helix in semiconductor quantum wells. // Nature. 2009. Vol. 458, no. 7238. P. 610.
2. Nefyodov Y. A., Shchepetilnikov A. V., Kukushkin I. V. et al. Electron g -factor anisotropy in GaAs/Al_{1-x}Ga_xAs quantum wells of different symmetry // Phys. Rev. B. 2011. Vol. 84. P. 233302.
3. Nefyodov Y. A., Shchepetilnikov A. V., Kukushkin I. V. et al. g -factor anisotropy in a GaAs/Al_{1-x}Ga_xAs quantum well probed by electron spin resonance // Phys. Rev. B. 2011. Vol. 83. P. 041307.
4. Tamm I. A possible kind of electron binding on crystal surfaces // Phys. Z. Sowjetunion. 1932. Vol. 1. P. 733.
5. Shockley W. On the Surface States Associated with a Periodic Potential // Phys. Rev. 1939. Vol. 56, no. 4. P. 317–323.
6. Peres N. M. R., Guinea F., Neto A. H. C. Electronic properties of disordered two-dimensional carbon // Phys. Rev. B. 2006. Vol. 73, no. 12. P. 125411.
7. Xu S.-Y., Belopolski I., Alidoust N. et al. Discovery of a Weyl fermion semimetal and topological Fermi arcs // Science. 2015. Vol. 349, no. 6248. P. 613.
8. Lv B., Xu N., Weng H. et al. Observation of Weyl nodes in TaAs // Nature Physics. 2015. Vol. 11, no. 9.
9. Yang L., Liu Z., Sun Y. et al. Weyl semimetal phase in the non-centrosymmetric compound TaAs // Nat. Phys. 2015. Vol. 11. P. 728.
10. Xu S.-Y., Alidoust N., Belopolski I. et al. Discovery of a Weyl fermion state with Fermi arcs in niobium arsenide // Nature Physics. 2015. Vol. 11, no. 9. P. 748.
11. **Девизорова Ж. А.**, Волков В. А. Спиновое расщепление 2D-состояний в зоне проводимости несимметричных гетероструктур: вклад атомарно резкого интерфейса // Письма в ЖЭТФ. 2013. Т.98, №2. С.110.
12. **Девизорова Ж. А.**, Щепетильников А. В., Нефедов Ю. А. et al.

- Интерфейсные вклады в параметры спин-орбитального взаимодействия для электронов на интерфейсе (001) GaAs/AlGaAs // Письма в ЖЭТФ. 2014. Т.100, №2. С.111.
13. Zagorodnev I. V., **Devizorova Zh. A.**, Enaldiev V. V. Resonant electron scattering by a graphene antidot // Phys. Rev. B. 2015. Vol. 92. P. 195413.
 14. **Devizorova Zh. A.**, Volkov V. A. Fermi arcs formation in Weyl semimetals: The key role of intervalley interaction // Phys. Rev. B. 2017. Vol. 95. P. 081302.
 15. **Девизорова Ж. А.**, Волков В. А. Спиновое расщепление электронного спектра в несимметричных гетероструктурах: вклад атомарно резкого интерфейса // Нелинейный мир. 2014. Т.12. С.72.
 16. **Девизорова Ж. А.**, Волков В. А. Вклады гетерограницы в параметры спин-орбитального взаимодействия для электронов на гетерогранице (001) GaAs/AlGaAs // Нелинейный мир. 2015. Т.13. С.7.
 17. **Девизорова Ж. А.**, Волков В. А. Граничные условия и спектр поверхностных состояний в Вейлевском полуметалле // Нелинейный мир. 2017. Т.15. С.16.
 18. **Девизорова Ж. А.**, Волков В. А. Интерфейсный вклад в спиновое расщепление спектра 2D электронов в нецентроинверсных структурах // Тезисы докладов 11-ой Российской конференции по физике полупроводников. 2013. С.99.
 19. **Девизорова Ж. А.**, Волков В. А. Нелинейное и анизотропное спиновое расщепление электронных уровней Ландау в GaAs-наноструктурах // Труды МФТИ. 2014. Т.6. С.39.
 20. **Devizorova Zh. A.**, Volkov V. A. Effect of heterointerface on spin splitting of 2D electron states in asymmetric heterostructures // Book of Abstracts. 9-th Advanced research workshop fundamentals of electronic nanosystems “Nano Piter 2014”. 2014. P. 33.
 21. **Девизорова Ж. А.**, Загороднев И. В., Волков В. А. Резонансное рассеяние электронов на квазистационарных таммовских уровнях

- графеновой антиточки // Сборник трудов 15-ой Школы молодых ученых "Актуальные проблемы физики". 2014. С.106.
22. **Девизорова Ж. А.**, Волков В. А. Вклад гетероинтерфейса GaAs/AlGaAs в спиновое расщепление спектра 2D-электронов // Сборник трудов 19-го Международного симпозиума "Нанозифика и нанозлектроника". 2015. С.481.
 23. **Devizorova Zh. A.**, Zagorodnev I. V., Enaldiev V. V. Electron scattering on edge states of graphene nanohole // Book of Abstracts. 21-st International Conference on Electronic Properties of Two-Dimensional Systems. 2015. P. 134.
 24. **Devizorova Zh. A.**, Volkov V. A. Interfacial contributions to the spin-orbit interaction parameters of 2D electrons at the (001) GaAs/AlGaAs interface // Book of Abstracts. 21-st International Conference on Electronic Properties of Two-Dimensional Systems. 2015. P. 490.
 25. Загороднев И. В., **Девизорова Ж. А.**, Еналдиев В. В., Волков В. А. Рассеяние электронов на квазистационарных уровнях графеновой антиточки // Сборник трудов 14-ой Международной школы-конференции "Проблемы физики твердого тела и высоких давлений". 2015. С.86.
 26. **Девизорова Ж. А.**, Волков В. А. Спин-орбитальное взаимодействие электронов с атомарно резкой гетерограницей в квантовой яме // Тезисы докладов 12-ой Российской конференции по физике олупроводников. 2015. С.313.
 27. Загороднев И. В., **Девизорова Ж. А.**, Еналдиев В. В. et al. Рассеяние электронов в графене на круглом наноотверстии // Тезисы докладов 12-ой Российской конференции по физике олупроводников. 2015. С.255.
 28. **Devizorova Zh. A.**, Zagorodnev I. V., Enaldiev V. V. Resonant electron scattering by a graphene antidot // Book of Abstracts. Graphene Week 2016. 2016. P. 411.
 29. Zagorodnev I. V., **Devizorova Zh. A.**, Enaldiev V. V. et al. A possible manifestaion of edge states in graphene // Book of Abstracts. Graphene Week. 2016.

P. 229.

30. **Девизорова Ж. А.**, Волков В. А. Формирование Ферми-арки в Вейлевском полуметалле: ключевая роль междолинного взаимодействия // Сборник трудов 21-го Международного симпозиума "Нанозфизика и наноэлектроника". 2017. С.573.
31. Волков В. А., **Девизорова Ж. А.** Аналитическая модель экзотических поверхностных состояний в топологических полуметаллах // Тезисы докладов 13-ой Российской конференции по физике полупроводников. 2017. С.428.
32. Malcher F., Lommer G., Rössler U. Electron states in GaAs/AlGaAs heterostructures: nonparabolicity and spin-splitting // Superlattices and Microstructures. 1986. Vol. 2, no. 3. P. 267.
33. Winkler R. Spin-orbit Coupling Effects in Two-dimensional Electron and Hole Systems. Springer, Berlin, 2003.
34. Ivchenko E., Pikus G. E. Superlattices and other heterostucture. Springer, Berlin, 1995.
35. Ivchenko E. Optical Spectroscopy of Semiconductor Nanostructures. Alpha Science, Harrow, UK, 2005.
36. Bychkov Y. A., Rashba E. Properties of a 2D electron gas with lifted spectral degeneracy // JETP lett. 1984. Vol. 39, no. 2. P. 78.
37. Leibler L. Effective-mass theory for carriers in graded mixed semiconductors. II. Spin effects // Phys. Rev. B. 1977. Vol. 16. P. 863.
38. Zawadzki W., Pfeffer P. Semicond. Sci. Technol. // Phys. Rev. B. 2004. Vol. 19. P. R1.
39. Foreman B. A. First-principles envelope-function theory for lattice-matched semiconductor heterostructures // Phys. Rev. B. 2005. Vol. 72. P. 165345.
40. Takhtamirov E., Volkov V. Generalization of the effective mass method for semiconductor structures with atomically sharp heterojunctions // Journal of Experimental and Theoretical Physics. 1999. Vol. 89, no. 5. P. 1000.

41. Rodina A. V., Alekseev A. Y., Efros A. L. et al. General boundary conditions for the envelope function in the multiband $k \cdot p$ model // Phys. Rev. B. 2002. Vol. 65. P. 125302.
42. Takhtamirov E., Volkov V. Envelope-function method for the conduction band in graded heterostructures // Semiconductor science and technology. 1997. Vol. 12, no. 1. P. 77.
43. Takhtamirov E., Melnik R. V. Spin-orbit interaction in three-dimensionally bounded semiconductor nanostructures // New Journal of Physics. 2010. Vol. 12, no. 12. P. 123006.
44. Волков В., Пинскер Т. Размерное квантование и поверхностные состояния в полупроводниках // ЖЭТФ. 1976. Т.70. С.2268.
45. Волков В., Пинскер Т. Закон дисперсии электрона в ограниченном кристалле // ЖЭТФ. 1977. Т.72. С. 1087.
46. Volkov V., Pinsker T. Boundary conditions, energy spectrum, and optical transitions of electrons in bounded narrow gap crystals // Surface Science. 1979. Vol. 81, no. 1. P. 181.
47. Vas'ko F. Spin splitting in the spectrum of two-dimensional electrons due to the surface potential // JETP Lett. 1979. Vol. 30, no. 9. P. 541.
48. Rodina A. V., Alekseev A. Y. Least-action principle for envelope functions in abrupt heterostructures // Phys. Rev. B. 2006. Vol. 73. P. 115312.
49. Fabian J., Matos-Abiaguea A., Ertlera C. et al. Semiconductor Spintronics // Acta Phys. Slovaca. 2007. Vol. 57. P. 565.
50. Dresselhaus P. D., Papavassiliou C. M. A., Wheeler R. G., Sacks R. N. Observation of spin precession in GaAs inversion layers using antilocalization // Phys. Rev. Lett. 1992. Vol. 68. P. 106.
51. Miller J. B., Zumbühl D. M., Marcus C. M. et al. Gate-Controlled Spin-Orbit Quantum Interference Effects in Lateral Transport // Phys. Rev. Lett. 2003. Vol. 90. P. 076807.
52. Richards D., Jusserand B., Allan G. et al. Electron spin-flip Raman scattering

- in asymmetric quantum wells: Spin orientation // *Solid-State Electronics*. 1996. Vol. 40, no. 1-8. P. 127.
53. Leyland W. J. H., Harley R. T., Henini M. et al. Oscillatory Dyakonov-Perel spin dynamics in two-dimensional electron gases // *Phys. Rev. B*. 2007. Vol. 76. P. 195305.
 54. Walser M. P., Siegenthaler U., Lechner V. et al. Dependence of the Dresselhaus spin-orbit interaction on the quantum well width // *Phys. Rev. B*. 2012. Vol. 86. P. 195309.
 55. Ganichev S. D., Golub L. E. Interplay of Rashba/Dresselhaus spin splittings probed by photogalvanic spectroscopy // *physica status solidi (b)*. 2014. Vol. 251, no. 9. P. 1801.
 56. Alekseev P. Anisotropic interface contribution to the spin-orbit interaction in quantum wells // *JETP letters*. 2013. Vol. 98, no. 2. P. 84.
 57. Eldridge P. S., Hübner J., Oertel S. et al. Spin-orbit fields in asymmetric (001)-oriented GaAs/Al_xGa_{1-x}As quantum wells // *Phys. Rev. B*. 2011. Vol. 83. P. 041301.
 58. Jusserand B., Richards D., Allan G. et al. Spin orientation at semiconductor heterointerfaces // *Phys. Rev. B*. 1995. Vol. 51. P. 4707–4710.
 59. Studer M., Salis G., Ensslin K. et al. Gate-Controlled Spin-Orbit Interaction in a Parabolic GaAs/AlGaAs Quantum Well // *Phys. Rev. Lett*. 2009. Vol. 103. P. 027201.
 60. Марущак В., Степанова М., Титков А. Спиновая релаксация электронов проводимости в умеренно легированных кристаллах GaAs // *ФТТ*. 1983. Т.25. С.3537.
 61. Пикус Г., Марущак В., Титков А. Спиновое расщепление зон и спиновая релаксация носителей в кубических кристаллах АІІІВV(обзор) // *ФТП*. 1988. Т.22. С.185.
 62. Krich J. J., Halperin B. I. Cubic Dresselhaus Spin-Orbit Coupling in 2D Electron Quantum Dots // *Phys. Rev. Lett*. 2007. Vol. 98. P. 226802.

63. Roth L. M. *g* Factor and Donor Spin-Lattice Relaxation for Electrons in Germanium and Silicon // Phys. Rev. 1960. Vol. 118. P. 1534.
64. Калевич В., Коренев В. Анизотропия электронного *g*-фактора в квантовых ямах GaAs/AlGaAs // Письма в ЖЭТФ. 1992. Т.56. С.257.
65. Ивченко Е., Киселев А. Электронный *g*-фактор в квантовых ямах и сверхрешетках // ФТП. 1992. Т.26. С.1471.
66. Калевич В., Коренев В. Анизотропия электронного *g*-фактора в асимметричной квантовой яме GaAs/AlGaAs // Письма в ЖЭТФ. 1993. Т.57. С.5257.
67. Murakami S. Phase transition between the quantum spin Hall and insulator phases in 3D: emergence of a topological gapless phase // New Journal of Physics. 2007. Vol. 9, no. 9. P. 356.
68. Wan X., Turner A. M., Vishwanath A., Savrasov S. Y. Topological semimetal and Fermi-arc surface states in the electronic structure of pyrochlore iridates // Phys. Rev. B. 2011. Vol. 83. P. 205101.
69. Young S. M., Zaheer S., Teo J. C. Y. et al. Dirac Semimetal in Three Dimensions // Phys. Rev. Lett. 2012. Vol. 108. P. 140405.
70. Yang K.-Y., Lu Y.-M., Ran Y. Quantum Hall effects in a Weyl semimetal: Possible application in pyrochlore iridates // Phys. Rev. B. 2011. Vol. 84. P. 075129.
71. Xu G., Weng H., Wang Z. et al. Chern Semimetal and the Quantized Anomalous Hall Effect in HgCr₂Se₄ // Phys. Rev. Lett. 2011. Vol. 107. P. 186806.
72. Burkov A. A., Balents L. Weyl Semimetal in a Topological Insulator Multilayer // Phys. Rev. Lett. 2011. Vol. 107. P. 127205.
73. Burkov A. A., Hook M. D., Balents L. Topological nodal semimetals // Phys. Rev. B. 2011. Vol. 84. P. 235126.
74. Halász G. B., Balents L. Time-reversal invariant realization of the Weyl semimetal phase // Phys. Rev. B. 2012. Vol. 85. P. 035103.
75. Wehling T., Black-Schaffer A., Balatsky A. Dirac materials // Advances in

- Physics. 2014. Vol. 63, no. 1. P. 1.
76. Ojanen T. Helical Fermi arcs and surface states in time-reversal invariant Weyl semimetals // Phys. Rev. B. 2013. Vol. 87. P. 245112.
 77. Hosur P. Friedel oscillations due to Fermi arcs in Weyl semimetals // Phys. Rev. B. 2012. Vol. 86. P. 195102.
 78. Potter A., Kimchi I., Vishwanath A. Quantum oscillations from surface Fermi arcs in Weyl and Dirac semimetals. // Nature communications. 2014. Vol. 5. P. 5161.
 79. Huang S.-M., Xu S.-Y., Belopolski I. et al. A Weyl Fermion semimetal with surface Fermi arcs in the transition metal monpnictide TaAs class // Nature communications. 2015. Vol. 6. P. 7373.
 80. Nakada K., Fujita M., Dresselhaus G., Dresselhaus M. S. Edge state in graphene ribbons: Nanometer size effect and edge shape dependence // Phys. Rev. B. 1996. Vol. 54. P. 17954.
 81. Beenakker C. W. J. Colloquium: Andreev reflection and Klein tunneling in graphene // Rev. Mod. Phys. 2008. Vol. 80. P. 1337.
 82. Kotov V. N., Uchoa B., Pereira V. M. et al. Electron-Electron Interactions in Graphene: Current Status and Perspectives // Rev. Mod. Phys. 2012. Vol. 84. P. 1067.
 83. Casiraghi C., Hartschuh A., Qian H. et al. Raman Spectroscopy of Graphene Edges // Nano Letters. 2009. Vol. 9, no. 4. P. 1433.
 84. Niimi Y., Matsui T., Kambara H. et al. Scanning tunneling microscopy and spectroscopy of the electronic local density of states of graphite surfaces near monoatomic step edges // Phys. Rev. B. 2006. Vol. 73. P. 085421.
 85. Park J., Lee J., Liu L. et al. Spatially resolved one-dimensional boundary states in graphene-hexagonal boron nitride planar heterostructures // Nature communications. 2014. Vol. 5. P. 5403.
 86. Ritter K. A., Lyding J. W. The influence of edge structure on the electronic properties of graphene quantum dots and nanoribbons // Nature materials.

2009. Vol. 8, no. 3. P. 235.
87. Tao C., Jiao L., Yazyev O. V. et al. Spatially resolving edge states of chiral graphene nanoribbons. // *Nature Physics*. 2011. Vol. 7, no. 8.
 88. van Ostaay J. A. M., Akhmerov A. R., Beenakker C. W. J., Wimmer M. Dirac boundary condition at the reconstructed zigzag edge of graphene // *Phys. Rev. B*. 2011. Vol. 84. P. 195434.
 89. Fujii S., Ziatdinov M., Ohtsuka M. et al. Role of edge geometry and chemistry in the electronic properties of graphene nanostructures // *Faraday discussions*. 2014. Vol. 173. P. 173.
 90. Maksimov P. A., Rozhkov A. V., Sboychakov A. O. Localized electron states near the armchair edge of graphene // *Phys. Rev. B*. 2013. Vol. 88. P. 245421.
 91. Shytov A. V., Katsnelson M. I., Levitov L. S. Vacuum Polarization and Screening of Supercritical Impurities in Graphene // *Phys. Rev. Lett.* 2007. Vol. 99. P. 236801.
 92. Berry M. V., Mondragon R. Neutrino billiards: time-reversal symmetry-breaking without magnetic fields // *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences / The Royal Society*. Vol. 412. 1987. P. 53–74.
 93. Rakyta P., Vigh M., Csordás A., Cserti J. Protected edge states in silicene antidots and dots in magnetic field // *Phys. Rev. B*. 2015. Vol. 91. P. 125412.
 94. Beneventano C. G., Fialkovsky I., Santangelo E. Zeros of combinations of Bessel functions and the mean charge of graphene nanodots // *Theoretical and Mathematical Physics*. 2016. Vol. 187, no. 1. P. 497.
 95. Allen M., Shtanko O., Fulga I. et al. Spatially resolved edge currents and guided-wave electronic states in graphene // *Nature Physics*. 2016. Vol. 12. P. 128.
 96. Wimmer M., Akhmerov A. R., Guinea F. Robustness of edge states in graphene quantum dots // *Phys. Rev. B*. 2010. Vol. 82. P. 045409.
 97. McCann E., Fal'ko V. I. Symmetry of boundary conditions of the Dirac equation for electrons in carbon nanotubes // *Journal of Physics: Condensed Matter*.

2004. Vol. 16, no. 13. P. 2371.
98. Akhmerov A. R., Beenakker C. W. J. Boundary conditions for Dirac fermions on a terminated honeycomb lattice // *Phys. Rev. B*. 2008. Vol. 77. P. 085423.
 99. Basko D. M. Boundary problems for Dirac electrons and edge-assisted Raman scattering in graphene // *Phys. Rev. B*. 2009. Vol. 79. P. 205428.
 100. Tkachov G. Dirac fermion quantization on graphene edges: Isospin-orbit coupling, zero modes, and spontaneous valley polarization // *Phys. Rev. B*. 2009. Vol. 79. P. 045429.
 101. Volkov V., Zagorodnev I. Electrons near a graphene edge // *Low Temperature Physics*. 2009. Vol. 35, no. 1. P. 2.
 102. Latyshev Y., Orlov A., Volkov V. et al. Transport of Massless Dirac Fermions in Non-topological Type Edge States // *Sci. Rep.* 2014. Vol. 4. P. 7578.
 103. Petersen R., Pedersen T. G. Quasiparticle properties of graphene antidot lattices // *Phys. Rev. B*. 2009. Vol. 80. P. 113404.
 104. Thomsen M. R., Brun S. J., Pedersen T. G. Dirac model of electronic transport in graphene antidot barriers // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2014. Vol. 26, no. 33. P. 335301.
 105. Dvorak M., Oswald W., Wu Z. Bandgap opening by patterning graphene // *Scientific reports*. 2013. Vol. 3.
 106. Park C.-H., Yang L., Son Y.-W. et al. Anisotropic behaviours of massless Dirac fermions in graphene under periodic potentials. // *Nature Physics*. 2008. Vol. 4, no. 3.
 107. Power S. R., Jauho A.-P. Electronic transport in disordered graphene antidot lattice devices // *Phys. Rev. B*. 2014. Vol. 90. P. 115408.
 108. Nikitin A. Y., Guinea F., Martin-Moreno L. Resonant plasmonic effects in periodic graphene antidot arrays // *Applied Physics Letters*. 2012. Vol. 101, no. 15. P. 151119.
 109. Shen T., Wu Y., Capano M. et al. Magnetoconductance oscillations in graphene antidot arrays // *Applied Physics Letters*. 2008. Vol. 93, no. 12. P. 122102.

110. Russo S., Oostinga J. B., Wehenkel D. et al. Observation of Aharonov-Bohm conductance oscillations in a graphene ring // *Phys. Rev. B.* 2008. Vol. 77. P. 085413.
111. Enaldiev V. V., Volkov V. A. Resonance absorption of terahertz radiation in nanoperforated graphene // *JETP letters.* 2016. Vol. 104, no. 9. P. 624.
112. Luttinger J. M., Kohn W. Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields // *Physical Review.* 1955. Vol. 97, no. 4. P. 869.
113. Lommer G., Malcher F., Rössler U. Reduced g factor of subband Landau levels in AlGaAs/GaAs heterostructures // *Physical Review B.* 1985. Vol. 32, no. 10. P. 6965.
114. Cardona M., Christensen N., Fasol G. Relativistic band structure and spin-orbit splitting of zinc-blende-type semiconductors // *Physical Review B.* 1988. Vol. 38, no. 3. P. 1806.
115. Studer M., Walser M. P., Baer S. et al. Role of linear and cubic terms for drift-induced Dresselhaus spin-orbit splitting in a two-dimensional electron gas // *Phys. Rev. B.* 2010. Vol. 82. P. 235320.
116. Volkov V., Pinsker T. Spin splitting of the electron spectrum in finite crystals having the relativistic band structures // *Sov. Phys. Solid State.* 1981. Vol. 23. P. 1022.
117. Enaldiev V. V., Zagorodnev I., Volkov V. Boundary conditions and surface state spectra in topological insulators // *JETP Letters.* 2015. Vol. 101, no. 2. P. 89.
118. Men'shov V. N., Tugushev V. V., Chulkov E. V. Engineering near-surface electron states in three-dimensional topological insulators // *JETP letters.* 2014. Vol. 98, no. 10. P. 603.
119. Li S., Andreev A. V. Spiraling Fermi arcs in Weyl materials // *Phys. Rev. B.* 2015. Vol. 92. P. 201107.
120. Sun Y., Wu S.-C., Yan B. Topological surface states and Fermi arcs of the noncentrosymmetric Weyl semimetals TaAs, TaP, NbAs, and NbP // *Phys.*

Rev. B. 2015. Vol. 92. P. 115428.

121. Vas'ko F. T., Raichev O. Quantum Kinetic Theory and Applications. Springer, New York, 2004.
122. Latyshev Y. I., Orlov A. P., Frolov A. et al. Orbital quantization in a system of edge Dirac fermions in nanoperforated graphene // JETP letters. 2013. Vol. 98, no. 4. P. 214.
123. Chen J., Jang C., Adam S. et al. Charged-impurity scattering in graphene // Nature Physics. 2008. Vol. 4, no. 5. P. 377.
124. Wang Y., Wong D., Shytov A. V. et al. Observing atomic collapse resonances in artificial nuclei on graphene // Science. 2013. Vol. 340, no. 6133. P. 734–737.
125. Novikov D. S. Elastic scattering theory and transport in graphene // Phys. Rev. B. 2007. Vol. 76. P. 245435.

Приложение А

g -фактор электрона проводимости

В этом приложении приведены некоторые промежуточные вычисления и громоздкие выражения, относящиеся к вычислению интерфейсных вкладов в g -фактор электрона проводимости.

После перехода к нулевым ГУ, преобразованный гамильтониан содержит поправку $\delta\hat{H}$, которая имеет вид $\delta\hat{H} = [\hat{\Gamma}, \hat{H}] = [(2), \hat{H}] + [(3), \hat{H}] + [(4), \hat{H}] + [(5), \hat{H}] + [(6), \hat{H}]$, где цифрой обозначен номер слагаемого в операторе $\hat{\Gamma}$ (1.74):

$$\begin{aligned}
 [(2), \hat{H}] = & \frac{qR}{m^*c} \hat{\pi}_x B_y - \frac{qR}{m^*c} \hat{\pi}_y B_x - R \partial_z V + \frac{qR\gamma_c}{\hbar^3 c} \left[\sigma_x (\pi_y^2 B_y - \pi_z^2 B_y - 2\{\pi_x, \pi_y\} B_x) + \right. \\
 & \left. + \sigma_y (\pi_x^2 B_x - \pi_z^2 B_x - 2\{\pi_x, \pi_y\} B_y) + \sigma_z (2\{\pi_x, \pi_z\} B_y + 2\{\pi_y, \pi_z\} B_x) \right] - \\
 & - \frac{a_{SO} q R \partial_z V}{c} ((\sigma_x B_x + \sigma_y B_y)), \quad (\text{A.1})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [(3), \hat{H}] = & -\frac{2m^* \tilde{\gamma}_c R}{\hbar^3} (\sigma_y \hat{\pi}_y - \sigma_x \hat{\pi}_x) \partial_z V + \frac{qR\tilde{\gamma}_c}{\hbar^3 c} \left[\sigma_y \left(-2\pi_y^2 B_x + 2\pi_z^2 B_x + 2\{\pi_x, \pi_y\} B_y - \right. \right. \\
 & \left. \left. - 2\{\pi_x, \pi_z\} B_z \right) - \sigma_x (2\pi_x^2 B_y - 2\pi_z^2 B_y - 2\{\pi_x, \pi_y\} B_x + 2\{\pi_y, \pi_z\} B_z) \right] - \\
 & - \frac{2m^* \tilde{\gamma}_c R \mu_B g^*}{\hbar^4} \left[-\sigma_z B_x \{\pi_y, \pi_z\} + \sigma_x B_z \{\pi_y, \pi_z\} - \sigma_z B_y \{\pi_x, \pi_z\} + \sigma_y B_z \{\pi_x, \pi_z\} \right], \quad (\text{A.2})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [(4), \hat{H}] = & -\frac{\mu_B g^* m^* \gamma_c R}{\hbar^4} (\hat{\pi}_x^2 - \hat{\pi}_y^2) (\sigma_y B_x - \sigma_x B_y) - \\
 & - \frac{2qR\gamma_c}{\hbar^3 c} \sigma_z \left(2B_z \{\pi_x, \pi_y\} - B_y \{\pi_x, \pi_z\} - B_x \{\pi_y, \pi_z\} \right), \quad (\text{A.3})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[(5), \hat{H}] = & \frac{\tilde{\chi}R^2}{\hbar}(\sigma_x \hat{\pi}_y - \sigma_y \hat{\pi}_x) \partial_z V - \frac{\tilde{\chi}R^2 q}{2\hbar m^* c} \left[\sigma_x (-2\pi_y^2 B_x + 2\pi_z^2 B_x + 2\{\pi_x, \pi_y\} B_y - \right. \\
& \left. - 2\{\pi_x, \pi_z\} B_z) - \sigma_y (2\pi_x^2 B_y - 2\pi_z^2 B_y - 2\{\pi_x, \pi_y\} B_x + 2\{\pi_y, \pi_z\} B_z) \right] + \\
& + \frac{\tilde{\chi}R^2 \mu_B g^*}{\hbar^2} \left(\sigma_z B_y \{\pi_y, \pi_z\} - \sigma_y B_z \{\pi_y, \pi_z\} + \sigma_z B_x \{\pi_x, \pi_z\} - \sigma_x B_z \{\pi_x, \pi_z\} \right)
\end{aligned} \tag{A.4}$$

$$[(6), \hat{H}] = -\frac{|\mu_B| m^* h_1 R}{\hbar^2} \partial_z V \boldsymbol{\sigma} \mathbf{B}. \tag{A.5}$$

При выводе были использованы коммутационные соотношения

$$\begin{aligned}
[\sigma_i, \sigma_j] &= 2ie_{ijk} \sigma_k, \\
[\hat{\pi}_i, \hat{\pi}_j] &= \frac{iq\hbar}{c} e_{ijk} B_k, \\
[\hat{\pi}_i^2, \hat{\pi}_j] &= \frac{2iq\hbar}{c} e_{ijk} \pi_i B_k, \\
[\hat{\pi}_i, \hat{\pi}_j \hat{\pi}_k^2] &= \frac{iq\hbar}{c} (\hat{\pi}_k^2 e_{ijl} B_l + 2\hat{\pi}_j \hat{\pi}_k e_{ikm} B_m), \\
[\hat{\pi}_i, \hat{\pi}_j^2 \hat{\pi}_k] &= \frac{iq\hbar}{c} (\hat{\pi}_j^2 e_{ikm} B_m + 2\hat{\pi}_j \hat{\pi}_k e_{ijl} B_l), \\
[\hat{\pi}_i \hat{\pi}_j, \hat{\pi}_k^2] &= \frac{2iq\hbar}{c} (\hat{\pi}_k \hat{\pi}_j e_{ikl} B_l + \hat{\pi}_i \hat{\pi}_k e_{jkm} B_m), \\
[\hat{\pi}_i^2, \hat{\pi}_j^2] &= -\frac{4iq\hbar}{c} \{\pi_i, \pi_j\} e_{ijk} B_k.
\end{aligned}$$

Эффективный двумерный гамильтониан n -ой подзоны имеет вид $\hat{H}_{2D} = (\hat{H})_{nn} + (\delta\hat{H})_{nn}$, где

$$\begin{aligned}
(\hat{H})_{nn} = & E_n + \frac{1}{2m^*} \left(\hat{p}_x - \frac{q}{c} B_y z_{nn} + \frac{q}{c} B_z y \right)^2 + \frac{1}{2m^*} \left(\hat{p}_y + \frac{q}{c} B_x z_{nn} \right)^2 + \\
& + \frac{q^2}{2m^* c^2} (B_x^2 + B_y^2) [(z^2)_{nn} - z_{nn}^2] - \frac{1}{2} g^* \mu_B \boldsymbol{\sigma} \mathbf{B} + \\
& + \frac{\gamma_c}{\hbar^3} (\hat{p}_z^2)_{nn} \left[\sigma_y \left(\hat{p}_y + \frac{q}{c} B_x z_{nn} \right) - \sigma_x \left(\hat{p}_x - \frac{q}{c} B_y z_{nn} + \frac{q}{c} B_z y \right) \right] + \\
& + \frac{\gamma_c q}{\hbar^3 c} [(p_z^2 z)_{nn} - (p_z^2)_{nn} z_{nn}] (\sigma_y B_x + \sigma_x B_y) + \\
& + \frac{\gamma_c}{\hbar^3} \sigma_x \left\{ \left(\hat{p}_x - \frac{q}{c} B_y z_{nn} + \frac{q}{c} B_z y \right), \left(\hat{p}_y + \frac{q}{c} B_x z_{nn} \right)^2 \right\} + \sigma_x \left[-\frac{2q^2}{c^2} \hat{p}_y B_x B_y ((z^2)_{nn} - z_{nn}^2) + \right. \\
& + \left. \frac{q^2}{c^2} B_x^2 \left(\hat{p}_x + \frac{q}{c} B_z y \right) ((z^2)_{nn} - z_{nn}^2) - \frac{q^3}{c^3} B_x^2 B_y ((z^3)_{nn} - z_{nn}^3) \right] - \\
& - \sigma_y \left\{ \left(\hat{p}_y + \frac{q}{c} B_x z_{nn} \right), \left(\hat{p}_x - \frac{q}{c} B_y z_{nn} + \frac{q}{c} B_z y \right)^2 \right\} - \\
& - \frac{\gamma_c}{\hbar^3} \sigma_y \left[-\frac{2q^2}{c^2} \left(\hat{p}_x + \frac{q}{c} B_z y \right) B_x B_y ((z^2)_{nn} - z_{nn}^2) + \frac{q^2}{c^2} B_y^2 \hat{p}_x ((z^2)_{nn} - z_{nn}^2) + \right. \\
& + \left. \frac{q^3}{c^3} B_x B_y^2 ((z^3)_{nn} - z_{nn}^3) \right] + a_{SO} \left[\sigma_x \left(\hat{p}_y + \frac{q}{c} B_x z_{nn} \right) - \sigma_y \left(\hat{p}_x - \frac{q}{c} B_y z_{nn} + \frac{q}{c} B_z y \right) \right] \times \\
& \times (\partial_z V)_{nn} + \frac{a_{SO} q}{c} [(z \partial_z V)_{nn} - z_{nn} (\partial_z V)_{nn}] (\sigma_x B_x + \sigma_y B_y) - \\
& - \frac{1}{2} \mu_B \frac{\hbar_1}{\hbar^2} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{B} \left[(\hat{p}_z^2)_{nn} + \left(\hat{p}_x - \frac{q}{c} B_y z_{nn} + \frac{q}{c} B_z y \right)^2 + \left(\hat{p}_y + \frac{q}{c} B_x z_{nn} \right)^2 \right], \quad (\text{A.6})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
(\delta\hat{H})_{nn} = & -R(\partial_z V)_{nn} + \frac{qR}{m^*c} \left(\hat{p}_x - \frac{q}{c} B_y z_{nn} + \frac{q}{c} B_z y \right) B_y - \frac{qR}{m^*c} \left(\hat{p}_y + \frac{q}{c} B_x z_{nn} \right) B_x - \\
& - \frac{a_{SO} q R (\partial_z V)_{nn}}{c} (\sigma_x B_x + \sigma_y B_y) - \frac{2m^* \tilde{\gamma}_c R}{\hbar^3} \left[\sigma_y \left(\hat{p}_y + \frac{q}{c} B_x z_{nn} \right) - \sigma_x \left(\hat{p}_x - \frac{q}{c} B_y z_{nn} + \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{q}{c} B_z y \right) \right] (\partial_z V)_{nn} - \frac{2m^* \tilde{\gamma}_c R q}{\hbar^3 c} (\sigma_y B_x + \sigma_x B_y) [(z \partial_z V)_{nn} - z_{nn} (\partial_z V)_{nn}] + \\
& + \frac{\tilde{\chi} R^2}{\hbar} \left[\sigma_x \left(\hat{p}_y + \frac{q}{c} B_x z_{nn} \right) - \sigma_y \left(\hat{p}_x - \frac{q}{c} B_y z_{nn} + \frac{q}{c} B_z y \right) \right] (\partial_z V)_{nn} + \frac{\tilde{\chi} R^2 q}{\hbar c} \left[(z \partial_z V)_{nn} - \right. \\
& \left. - z_{nn} (\partial_z V)_{nn} \right] (\sigma_x B_x + \sigma_y B_y) + \frac{qR\gamma_c}{\hbar^3 c} \left[\sigma_x B_y \left((\hat{p}_z^2)_{nn} - 2 \left(\hat{p}_x - \frac{q}{c} B_y z_{nn} + \frac{q}{c} B_z y \right)^2 - \right. \right. \\
& \left. \left. - \frac{2q^2}{c^2} B_y^2 ((z^2)_{nn} - z_{nn}^2) + \left(\hat{p}_y + \frac{q}{c} B_x z_{nn} \right)^2 + \frac{q^2}{c^2} B_x^2 ((z^2)_{nn} - z_{nn}^2) \right) + \right. \\
& \left. + \sigma_y B_x \left((\hat{p}_z^2)_{nn} - 2 \left(\hat{p}_y + \frac{q}{c} B_x z_{nn} \right)^2 - \frac{2q^2}{c^2} B_x^2 ((z^2)_{nn} - z_{nn}^2) + \left(\hat{p}_x - \frac{q}{c} B_y z_{nn} + \frac{q}{c} B_z y \right)^2 + \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{q^2}{c^2} B_y^2 ((z^2)_{nn} - z_{nn}^2) \right) \right] + \frac{2qR(\tilde{\gamma}_c - \gamma_c)}{\hbar^3 c} \left[\sigma_x B_y \left((\hat{p}_z^2)_{nn} - \left(\hat{p}_x - \frac{q}{c} B_y z_{nn} + \frac{q}{c} B_z y \right)^2 \right) + \right. \\
& \left. + \sigma_y B_x \left((\hat{p}_z^2)_{nn} - \left(\hat{p}_y + \frac{q}{c} B_x z_{nn} \right)^2 \right) + \left\{ \hat{p}_x - \frac{q}{c} B_y z_{nn} + \frac{q}{c} B_z y, \hat{p}_y + \frac{q}{c} B_x z_{nn} \right\} (\sigma_x B_x + \right. \\
& \left. + \sigma_y B_y) \right] - \frac{\tilde{\chi} R^2 q}{\hbar m^* c} \left[\sigma_x B_x \left((\hat{p}_z^2)_{nn} - \left(\hat{p}_y + \frac{q}{c} B_x z_{nn} \right)^2 - \frac{q^2}{c^2} B_x^2 ((z^2)_{nn} - z_{nn}^2) \right) + \right. \\
& \left. + \sigma_x B_y \left(\left\{ \hat{p}_x - \frac{q}{c} B_y z_{nn} + \frac{q}{c} B_z y, \hat{p}_y + \frac{q}{c} B_x z_{nn} \right\} - \frac{q^2}{c^2} B_x B_y ((z^2)_{nn} - z_{nn}^2) \right) + \right. \\
& \left. + \sigma_y B_y \left((\hat{p}_z^2)_{nn} - \left(\hat{p}_x - \frac{q}{c} B_y z_{nn} + \frac{q}{c} B_z y \right)^2 - \frac{q^2}{c^2} B_y^2 ((z^2)_{nn} - z_{nn}^2) \right) + \right. \\
& \left. + \sigma_y B_x \left(\left\{ \hat{p}_x - \frac{q}{c} B_y z_{nn} + \frac{q}{c} B_z y, \hat{p}_y + \frac{q}{c} B_x z_{nn} \right\} - \frac{q^2}{c^2} B_x B_y ((z^2)_{nn} - z_{nn}^2) \right) \right] - \\
& - \frac{4qR\gamma_c}{\hbar^3 c} \sigma_z B_z \left[\left\{ \hat{p}_x - \frac{q}{c} B_y z_{nn} + \frac{q}{c} B_z y, \hat{p}_y + \frac{q}{c} B_x z_{nn} \right\} - \frac{q^2}{c^2} B_x B_y ((z^2)_{nn} - z_{nn}^2) \right] - \\
& - \frac{\mu_B g^* m^* \gamma_c R}{\hbar^4} (\sigma_y B_x - \sigma_x B_y) \left[\left(\hat{p}_x - \frac{q}{c} B_y z_{nn} + \frac{q}{c} B_z y \right)^2 - \left(\hat{p}_y + \frac{q}{c} B_x z_{nn} \right)^2 + \right. \\
& \left. + \frac{q^2}{c^2} B_y^2 ((z^2)_{nn} - z_{nn}^2) - \frac{q^2}{c^2} B_x^2 ((z^2)_{nn} - z_{nn}^2) \right] - \frac{|\mu_B| m^* h_1 R}{\hbar^2} (\partial_z V)_{nn} \boldsymbol{\sigma} \mathbf{B}. \quad (\text{A.7})
\end{aligned}$$

Преобразованный спиновый вклад в эффективный 2D гамильтониан:

$$\begin{aligned}
\delta\hat{H}_s = & -\frac{1}{2}g^*\mu_B\boldsymbol{\sigma}\mathbf{B} + \frac{\gamma_c}{\hbar^3}(\hat{p}_z^2)_{nn} \left[\sigma_y \left(\hat{p}_y + \frac{q}{c}B_xR \right) - \sigma_x \left(\hat{p}_x - \frac{q}{c}B_yR + \frac{q}{c}B_zy \right) \right] + \\
& + \frac{\gamma_c q}{\hbar^3 c} [(p_z^2 z)_{nn} - (p_z^2)_{nn} z_{nn}] (\sigma_y B_x + \sigma_x B_y) + \frac{\gamma_c}{\hbar^3} \sigma_x \left\{ \hat{p}_x - \frac{q}{c}B_yR + \frac{q}{c}B_zy, \left(\hat{p}_y + \frac{q}{c}B_xR \right)^2 \right\} - \\
& - \frac{\gamma_c}{\hbar^3} \sigma_y \left\{ \hat{p}_y + \frac{q}{c}B_xR, \left(\hat{p}_x - \frac{q}{c}B_yR + \frac{q}{c}B_zy \right)^2 \right\} + a_{SO} \left[\sigma_x \left(\hat{p}_y + \frac{q}{c}B_xR \right) - \right. \\
& - \left. \sigma_y \left(\hat{p}_x - \frac{q}{c}B_yR + \frac{q}{c}B_zy \right) \right] (\partial_z V)_{nn} + \frac{a_{SO} q}{c} [(z\partial_z V)_{nn} - z_{nn}(\partial_z V)_{nn}] (\sigma_x B_x + \sigma_y B_y) - \\
& - \frac{2m^* \tilde{\gamma}_c R}{\hbar^3} \left[\sigma_y \left(\hat{p}_y + \frac{q}{c}B_xR \right) - \sigma_x \left(\hat{p}_x - \frac{q}{c}B_yR + \frac{q}{c}B_zy \right) \right] (\partial_z V)_{nn} - \\
& - \frac{2m^* \tilde{\gamma}_c R q}{\hbar^3 c} (\sigma_y B_x + \sigma_x B_y) [(z\partial_z V)_{nn} - z_{nn}(\partial_z V)_{nn}] + \\
& + \frac{\tilde{\chi} R^2}{\hbar} \left[\sigma_x \left(\hat{p}_y + \frac{q}{c}B_xR \right) - \sigma_y \left(\hat{p}_x - \frac{q}{c}B_yR + \frac{q}{c}B_zy \right) \right] (\partial_z V)_{nn} + \\
& + \frac{\tilde{\chi} R^2 q}{\hbar c} [(z\partial_z V)_{nn} - z_{nn}(\partial_z V)_{nn}] (\sigma_x B_x + \sigma_y B_y) + \\
& + \frac{qR\gamma_c}{\hbar^3 c} \left[\sigma_x B_y \left((\hat{p}_z^2)_{nn} - 2 \left(\hat{p}_x - \frac{q}{c}B_yR + \frac{q}{c}B_zy \right)^2 + \left(\hat{p}_y + \frac{q}{c}B_xR \right)^2 \right) + \right. \\
& + \left. \sigma_y B_x \left((\hat{p}_z^2)_{nn} - 2 \left(\hat{p}_y + \frac{q}{c}B_xR \right)^2 + \left(\hat{p}_x - \frac{q}{c}B_yR + \frac{q}{c}B_zy \right)^2 \right) \right] + \\
& + \frac{2qR(\tilde{\gamma}_c - \gamma_c)}{\hbar^3 c} \left[\sigma_x B_y \left((\hat{p}_z^2)_{nn} - \left(\hat{p}_x - \frac{q}{c}B_yR + \frac{q}{c}B_zy \right)^2 \right) + \sigma_y B_x \left((\hat{p}_z^2)_{nn} - \right. \right. \\
& - \left. \left. \left(\hat{p}_y + \frac{q}{c}B_xR \right)^2 \right) + \left\{ \hat{p}_x - \frac{q}{c}B_yR + \frac{q}{c}B_zy, \hat{p}_y + \frac{q}{c}B_xR \right\} (\sigma_x B_x + \sigma_y B_y) \right] - \\
& - \frac{\tilde{\chi} R^2 q}{\hbar m^* c} \left[\sigma_x B_x \left((p_z^2)_{nn} - \left(\hat{p}_y + \frac{q}{c}B_xR \right)^2 \right) + \sigma_x B_y \left\{ \hat{p}_x - \frac{q}{c}B_yR + \frac{q}{c}B_zy, \hat{p}_y + \frac{q}{c}B_xR \right\} + \right. \\
& + \left. \sigma_y B_y \left((p_z^2)_{nn} - \left(\hat{p}_x - \frac{q}{c}B_yR + \frac{q}{c}B_zy \right)^2 \right) + \sigma_y B_x \left\{ \hat{p}_x - \frac{q}{c}B_yR + \frac{q}{c}B_zy, \hat{p}_y + \frac{q}{c}B_xR \right\} \right] - \\
& - \frac{4qR\tilde{\gamma}_c}{\hbar^3 c} \sigma_z B_z \left\{ \hat{p}_x - \frac{q}{c}B_yR + \frac{q}{c}B_zy, \hat{p}_y + \frac{q}{c}B_xR \right\} - \\
& - \frac{\mu_B g^* m^* \gamma_c R}{\hbar^4} (\sigma_y B_x - \sigma_x B_y) \left[\left(\hat{p}_x - \frac{q}{c}B_yR + \frac{q}{c}B_zy \right)^2 - \left(\hat{p}_y + \frac{q}{c}B_xR \right)^2 \right] - \\
& - \frac{1}{2} \mu_B \frac{\hbar_1}{\hbar^2} \boldsymbol{\sigma}\mathbf{B} \left[(\hat{p}_z^2)_{nn} + \left(\hat{p}_x - \frac{q}{c}B_yR + \frac{q}{c}B_zy \right)^2 + \left(\hat{p}_y + \frac{q}{c}B_xR \right)^2 \right] - \\
& - \frac{a_{SO} q R (\partial_z V)_{nn}}{c} (\sigma_x B_x + \sigma_y B_y) - \frac{|\mu_B| m^* \hbar_1 R}{\hbar^2} (\partial_z V)_{nn} \boldsymbol{\sigma}\mathbf{B}. \quad (\text{A.8})
\end{aligned}$$