

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

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Москва – 2017

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институте радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова Российской академии наук (ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН), г.Москва.

Научный руководитель: **Волков Владимир Александрович**,
доктор физико-математических наук

Официальные оппоненты: **Ивченко Еугениус Левович**
доктор физико-математических наук, профессор, член-корреспондент РАН, главный научный сотрудник сектора Теории квантовых когерентных явлений в твердом теле ФГБУН Физико-технического института им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук

Рожков Александр Владимирович
доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник лаборатории №1 ФГБУН Института теоретической и прикладной электродинамики Российской академии наук
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова"

Ведущая организация:

Защита состоится " " 2018 г., в 10-00 на заседании диссертационного совета Д.002.231.01 на базе Федерального государственного бюджетного учреждения науки Института радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова Российской академии наук (ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН) по адресу: 125009, г. Москва, ул.Моховая, д.11, корп.7.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ИРЭ им. В.А. Котельникова РАН и на сайте <http://www.cplire.ru/rus/dissertations/Devizorova/index.html>

Автореферат разослан " " 2018 г.

Ученый секретарь диссертационного совета,
доктор физико-математических наук, доцент

 Кузнецова
Ирен Евгеньевна

Общая характеристика работы

Актуальность темы исследования. Зачастую в задачах физики конденсированного состояния пренебрегается эффектами, связанными с существованием границ раздела. Это приближение хорошо работает для массивных образцов, но в системах пониженной размерности граничные эффекты могут оказаться существенными. Одной из систем, где проявляются интерфейсные эффекты, являются квантовые ямы на основе GaAs/AlGaAs, которые перспективны для создания приборов спинтроники, активно развивающегося 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 взаимодействие (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 наноструктур 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 Таммом и Шокли, но стали интенсивно изучаться экспериментально сравнительно недавно, после появления графена и топологических изоляторов. Краевые состояния в

графене образуют дополнительный проводящий канал вблизи его краев 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 в начале XX века, но огромные усилия по их обнаружению долгое время были безрезультатными. Лишь в 2015 году они были обнаружены экспериментально [4], 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 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 фермионы.

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 со-

стояний, 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, которая согласуется с экспериментами по фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением. Впервые рассчитана локальная плотность состояний на антиточке в графене, которая поддерживает краевые состояния.

Практическая значимость. Разработанная модель поверхностных состояний в вейлевских полуметаллах позволяет сравнительно легко учитывать влияние на вейлевские фермионы электрических и магнитных полей, что может облегчить создание электронных приборов на основе этих материалов.

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-Рашбы.
3. Предложено граничное условие для огибающих функций на поверхности вейлевского полуметалла, удовлетворяющее требованиям самосопряженности и симметрии, а также учитывающее внутридолинное 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 антиоточки в графене, поддерживающей квазистационарные краевые состояния, резонансно зависит от энергии. При удалении от антиоточки 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 и 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 «Нанозифика и наноэлектроника» (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 Минобрнауки и науки РФ [A1, A2, A3, A4], а также 17 публикаций в сборниках трудов и тезисов конференций [A5–A21].

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 одного го приложения. Работа содержит 99 страниц, включая 18 рисунков, 2 таблицы и список литературы из 125 источников.

Содержание работы

Во **Введении** обоснована актуальность диссертационной работы, сформулированы цели, научная новизна и практическая значимость работы, представлены научные положения, выносимые на защиту. Затем следует **Обзор литературы**, который 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 (ГУ) для огибающих функций электрона проводимости на единичном

гетероинтерфейсе типа GaAs/AlGaAs с симметрией C_{2v}

$$\left[1 - i\frac{R\hat{p}_z}{\hbar} - i\frac{2m^*\gamma_c R}{\hbar^4}(\sigma_y p_y - \sigma_x p_x)\hat{p}_z - i\frac{m^*\gamma_c R}{\hbar^4}\sigma_z(p_x^2 - p_y^2) + \right. \\ \left. + \frac{(\chi + \chi^{int})R}{\hbar}(\sigma_x p_y - \sigma_y p_x) - \frac{2m^*\gamma_c^{int}}{\hbar^3}(\sigma_y p_y - \sigma_x p_x) \right] \phi \Big|_{z=0} = 0. \quad (1)$$

Здесь оси x , y и z совпадают с направлениями $[100]$, $[010]$ и $[001]$; внешняя нормаль к границе направлена вдоль оси z ; ϕ – огибающая функция зоны проводимости; p_x , p_y – компоненты импульса электрона в плоскости гетероструктуры; $\hat{p}_z = -i\hbar\partial_z$; $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ – матрицы Паули; γ_c и χ определяются объемными спин-орбитальными параметрами; R , γ_c^{int} , χ^{int} – феноменологические константы, зависящие от микроскопического строения границы. Вещественная величина R имеет смысл глубины локализации мелкого таммовского состояния, когда оно существует, а параметры γ_c^{int} и χ^{int} характеризуют спин-орбитальное взаимодействие (СОВ) с гетероинтерфейсным кристаллическим потенциалом.

Раздел **1.2** посвящен теории спинового расщепления спектра 2D электронов без магнитного поля. Односторонне легированная КЯ на основе GaAs рассматривается как квазипотенциальная яма $V(z)$, электроны в которой прижаты внутренним электрическим полем к гетероинтерфейсу (001) GaAs / AlGaAs. Динамика электрона вне интерфейса ($z < 0$) описывается однозонным гамильтонианом в приближении эффективной массы с учетом членов, определяющих спиновое расщепление за счет отсутствия центра инверсии в кристалле и асимметрии ямы. На атомарно резком гетероинтерфейсе этот гамильтониан дополнен ГУ (1), что позволяет учесть информацию о микроскопическом строении границы. Считая отличие ГУ от нулевых малыми, задача с исходным гамильтонианом и ГУ (1) сводится к новой, более простой, с нулевыми ГУ и перенормированным за счет интерфейсного вклада гамильтонианом. После усреднения перенормированного 3D гамильтониана по функциям основной подзоны, получен эффективный 2D гамильтониан, который содержит термы

Дрессельхауза и Бычкова-Рашбы. В соответствующие константы α_{BIA} и α_{SIA} , помимо известных объемных вкладов [5] $\alpha_{BIA}^{(0)} = [\gamma_c(\hat{p}_z^2)_{00}]/\hbar^3$ и $\alpha_{SIA}^{(0)} = -eFa_{SO}$, где a_{SO} —объемная спин-орбитальная константа, будут входить как скалярный вклад интерфейса (R), так и перенормированные параметры СОВ типа Дрессельхауза ($\tilde{\gamma}_c = \gamma_c + \gamma_c^{int}$) и типа Рашбы ($\tilde{\chi} = \chi + \chi^{int}$):

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

$$\alpha_{BIA} = \frac{\gamma_c}{\hbar^3}(\hat{p}_z^2)_{00} + \frac{2m^*\tilde{\gamma}_c}{\hbar^3}eFR, \quad \alpha_{SIA} = -eF \left(a_{SO} + \frac{\tilde{\chi}R^2}{\hbar} \right), \quad (3)$$

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

В этом же разделе рассматривается узкая КЯ, в которой энергия размерного квантования существенно превосходит энергию взаимодействия с электрическим полем. В такой системе рассчитана перенормировка параметров α_{BIA} и α_{SIA} за счет интерфейсного спин-орбитального взаимодействия (ИСОВ) на двух гетерограницах. Показано, что неэквивалентность интерфейсов приводит к отличию от нуля параметра α_{SIA} и, как следствие, анизотропии спинового расщепления даже в отсутствие электрического поля. Этот результат может объяснить экспериментальные данные [1], где наблюдалась существенно ненулевая α_{SIA} в номинально симметричной КЯ.

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. 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 для основной подзоны определяются выражениями:

$$g_{zz}(0) = g^* + \frac{2m^*h_1}{\hbar^2} \left(\frac{(p_z^2)_{00}}{2m^*} + eFR \right), \quad d_{zz} = \frac{2eh_1}{c\hbar} \left(N + \frac{1}{2} \right), \quad (4)$$

$R = -22 \text{ \AA}$			$2m^*h_1/\hbar^2 = 4.8 \text{ 1/\AA}$	
$\tilde{\gamma}_c = \gamma_c + \gamma_c^{int}$	$\gamma_c > 0$	$\gamma_c < 0$	$\tilde{\chi} = \chi + \chi^{int}$	
$\gamma_c (\text{эВ} \times \text{Å}^3)$	24.4	-24.4	χ	0.082
$\tilde{\gamma}_c (\text{эВ} \times \text{Å}^3)$	22.2	-13.2	$\tilde{\chi}$	0.015
$\gamma_c^{int} (\text{эВ} \times \text{Å}^3)$	-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. 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 [A2]. Далее рассчитаны объемные константы Рашбы ($\alpha_{SIA}^{(0)}$) и Дрессельхауза ($\alpha_{BIA}^{(0)}$) и их интерфейсные перенормировки α_{SIA}^{int} и α_{BIA}^{int} , соответственно.

$$g_{xx}(0) = g_{yy}(0) = g^* + \frac{4\tilde{\chi}R^2m_0}{\hbar^2} \frac{(p_z^2)_{00}}{m^*} + \frac{2m^*h_1}{\hbar^2} \left(\frac{(p_z^2)_{00}}{2m^*} + eFR \right), \quad (5)$$

$$d_{xx} = d_{yy} = \frac{2eh_1}{c\hbar} \left(N + \frac{1}{2} \right) - \frac{4\tilde{\chi}R^2m_0e}{m^*c\hbar} \left(N + \frac{1}{2} \right), \quad (6)$$

$$g_{xy}(0) = g_{yx}(0) = -\frac{4m_0\gamma_c}{\hbar^4} |(p_z^2)_{00}z_{00} - (p_z^2z)_{00}| - \frac{8m_0m^*R\tilde{\gamma}_c}{\hbar^4} \frac{(p_z^2)_{00}}{m^*}, \quad (7)$$

$$d_{xy} = d_{yx} = \frac{8m_0e\tilde{\gamma}_cR}{c\hbar^3} \left(N + \frac{1}{2} \right), \quad (8)$$

где $g^* = -0.44$. Слагаемые в (4)–(8), пропорциональные R , γ_c^{int} , χ^{int} и их комбинациям представляют собой искомые интерфейсные вклады. При их занулении результаты (4)–(8) переходят в известные [6–8].

Раздел 1.4 посвящен сравнению построенной теории спинового расщепления уровней Ландау с экспериментальными данными по электронному парамагнитному резонансу. Известные из литературы выражения для d_{zz} и d_{xx} равны друг другу 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 (6)]. Также в экспериментах [2, 3] было обнаружено недиагональное слагаемое d_{xy} , которое, как видно из (8), определяется интерфейсным вкладом. Таким образом, построенная теория качественно, по крайней мере, описывает эксперимент [2, 3].

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

Для количественной проверки теории произведены дополнительные экспериментальные исследования спинового расщепления электронного спектра в широкой квантовой яме GaAs/AlGaAs с большим встроенным электрическим полем [A2], что обеспечивает применимость теории. Количественное описание экспериментальных данных возможно лишь при учете всех интерфейсных вкладов в g -фактор и $d_{\alpha\beta}$ (4)–(8). Из сравнения теоретических выражений для компонент тензора g (4), (5), (7) с экспериментальными данными извлечены интерфейсные параметры, величина которых оказывается сравнимой с объемными вкладами (см. Табл.1). Эти параметры использованы для количественного описания производных $d_{\alpha\beta}$ (см. Табл.2). Результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными для d_{zz} и d_{xx} . Знак и абсолютная величина d_{xy} зависят от выбора знака объемной γ_c (см. Табл.2). Также рассчитаны параметры α_{VIA} и α_{SIA} , интерфейсные вклады в которые по величине оказались сравнимы с объемными. Таким образом, имеющийся в литературе большой разброс экспериментальных данных по спиновым константам (см., например, введение в [A2]) может быть связан с неполным учетом ИСОВ.

Вторая глава, содержащая 3 раздела, посвящена построению аналитической модели поверхностных состояний (ПС) в вейлевском полуметалле, которая описывает экспериментальные данные [4] и легко обобщается на наличие внешних полей. В двухдолинном приближении огибающая функция электрона в вейлевском полуметалле с энергией E подчиняется уравнению типа Дирака

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma}(\hat{\mathbf{p}} + \mathbf{p}_0) & \Delta\sigma_x \\ \Delta\sigma_x & -\boldsymbol{\sigma}(\hat{\mathbf{p}} - \mathbf{p}_0) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi \\ \phi \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi \\ \phi \end{pmatrix}, \quad (9)$$

где $\psi = (\psi_1, \psi_2)^T$, $\phi = (\phi_1, \phi_2)^T$ – двухкомпонентные псевдоспиноры, $\mathbf{p} = (\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z)$ – оператор импульса, Δ характеризует объемное междолинное взаимодействие, $\mathbf{p}_0 = (p_0, 0, 0)$ определяет положение вейлевских точек при $\Delta = 0$, вейлевская скорость положена равной $v = 1$.

Для описания ПС гамильтониан (9) должен быть дополнен ГУ на поверхности образца. В разделе **2.1** из общезначимых требований получено ГУ для полубесконечной системы ($z > 0$): $(\psi + i\hat{g}\phi)|_{z=0} = 0$,

$$g(\alpha, \gamma) = \frac{i}{\sqrt{\gamma}} \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} & \mp i\sqrt{1-\gamma} \\ \pm i\sqrt{1-\gamma} & e^{i\alpha} \end{pmatrix}, \quad (10)$$

где $\alpha \in [0, 2\pi)$ и $\gamma \in (0, 1)$ есть два действительных феноменологических параметра, которые зависят как от объемной зонной структуры, так и от микроскопического строения интерфейса и могут быть определены из сравнения с экспериментом. Параметр α описывает внутридолинное, а параметр γ междолинное интерфейсное взаимодействие. В предельном случае $\gamma \rightarrow 0$ волновые функции в разных долинах подчиняются однодолинным ГУ следующего вида : $(\phi_1 + e^{i(\alpha-\pi/2)}\phi_2)|_{z=0} = 0$, $(\psi_1 + e^{-i(\alpha-\pi/2)}\psi_2)|_{z=0} = 0$. При рассмотрении одной долины ГУ подобного типа было получено в работе [10]. Однако в однодолинном приближении параметры ГУ в разных долинах, вообще говоря, различны. В данной диссертации показано, что эти параметры связаны. Кроме того, учтено интерфейсное междолинное взаимодействие, которое, как будет показано далее, играет ключевую роль при образовании ферми-арок.

В разделе **2.2** вычислены спектры и проанализированы ферми-контура ПС на поверхности (001) вейлевского полуметалла. Существуют два механизма междолинного взаимодействия: интерфейсный (характеризуется γ) и объемный (описывается Δ). Последний не приводит к образованию ферми-арок и

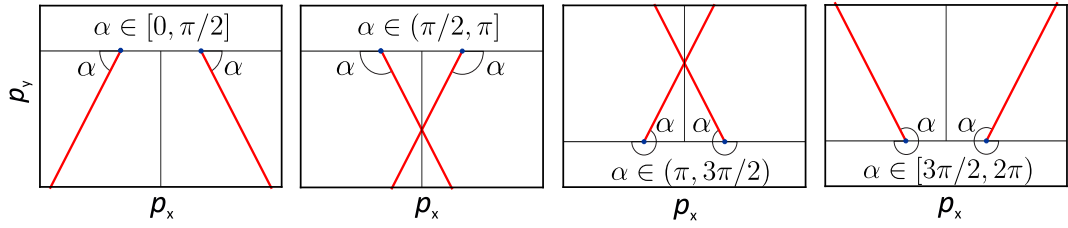


Рис. 1. Схематическое изображение ферми-контуров поверхностных состояний при $E = 0$ в отсутствие междолинного взаимодействия ($\gamma = 0$) для различных внутридолинных граничных параметров α . Синие кружки показывают проекции объемных вейлевских точек.

им можно пренебречь. В этом приближении получена система дисперсионных уравнений, которая определяет спектр ПС ($\hbar\kappa_{\pm} = \sqrt{(\mathbf{p} \pm \mathbf{p}_0)^2 - E^2}$)

$$\begin{aligned}
& \sqrt{1 - \gamma}[E(\hbar\kappa_- - \hbar\kappa_+) + 2p_x p_y] - \cos \alpha[2E p_x + (\hbar\kappa_- - \hbar\kappa_+) p_y] + \\
& + \sin \alpha[\hbar\kappa_+(p_x - p_0) + \hbar\kappa_-(p_x + p_0)] = 0, \\
& \sqrt{1 - \gamma}(E^2 + \hbar^2 \kappa_- \kappa_+ - p_x^2 + p_0^2 + p_y^2) - \cos \alpha[2E p_y + \hbar\kappa_+(p_x - p_0) - \hbar\kappa_-(p_x + p_0)] + \\
& + \sin \alpha[2E p_0 + (\hbar\kappa_+ + \hbar\kappa_-) p_y] = 0.
\end{aligned} \tag{11}$$

Для сравнения с экспериментами по фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением более наглядно анализировать не спектр, а ферми-контуры ПС при различных энергиях. В наиболее интересном случае $E = 0$ удобно ввести эллиптические координаты $p_x = p_0 \cosh u \cos v$, $p_y = p_0 \sinh u \sin v$. При этом система (11) эквивалентна одному уравнению $(\sqrt{1 - \gamma} \cosh u + \cos \alpha) \sin v = -\sin \alpha \sinh u$, которое задает связь параметров u и v .

В отсутствие междолинного взаимодействия ($\gamma = 0$), ферми-контур ПС – это лучи, исходящие из проекций объемных вейлевских точек, взаимная ориентация которых зависит от внутридолинного параметра α (см. Рис. 1).

Ферми-контур с учетом междолинного взаимодействия представлены на Рис. 2а и 3а. На Рис. 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-

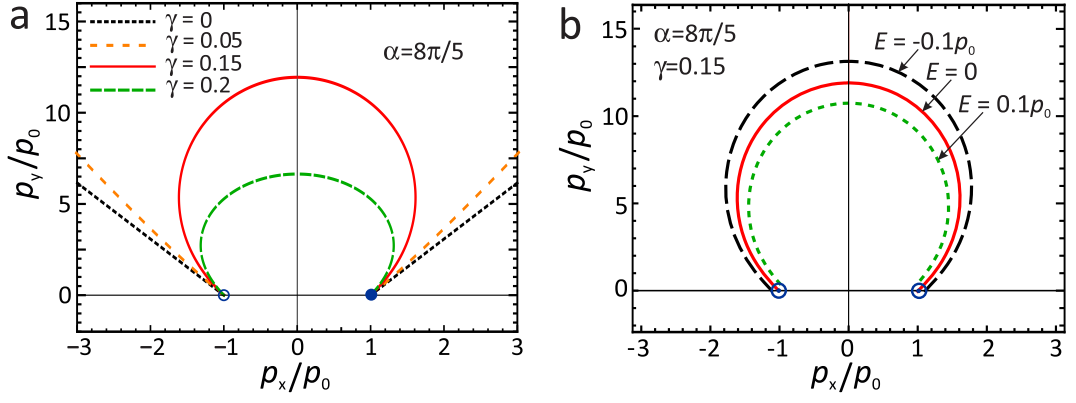


Рис. 2. (a) Зависимость формы ферми-контуров поверхностных состояний при $E = 0$ на поверхности (001) вейлевского полуметалла от силы интерфейсного междолинного взаимодействия γ при фиксированном внутридолинном граничном параметре α , который отвечает непересекающимся лучам в пределе $\gamma = 0$ (см. Рис.1). Синие кружки показывают положение объемных вейлевских точек с учетом киральности. (b) Модификация ферми-арок при изменении энергии. Синие кружки – это проекции объемных вейлевских конусов и точек.

поверхностей с ростом междолинного взаимодействия γ . Лучи будут замыкаться, образуя ферми-арку при $\gamma > \cos^2 \alpha$. Ферми-арки подобной формы недавно наблюдались экспериментально [4]. На Рис. За параметр α отвечает случаю, когда при $\gamma = 0$ лучи пересекаются в точке $p_x = 0$. Учет сколь угодно слабого междолинного взаимодействия приводит к рассталкиванию лучей и образованию двух ветвей, одна из которых является ферми-аркой, связывающей проекции объемных вейлевских точек. Зависимости формы ферми-арок от энергии для различных граничных параметров представлены на Рис. 2b и 3b.

В рамках рассмотренного двухдолинного приближения помимо ферми-арок существуют ферми-контур, представляющие собой лучи, исходящие из одной вейлевской точки, но не заканчивающиеся в другой. 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 [4]. По этой причине луч, начинающийся в одной из рассматриваемых вейлевских точек может заканчиваться, например, в вейлевской точке на другом краю зоны Бриллюэна. Такая возможность качественно продемонстрирована в разделе **2.3** в рамках простейшего

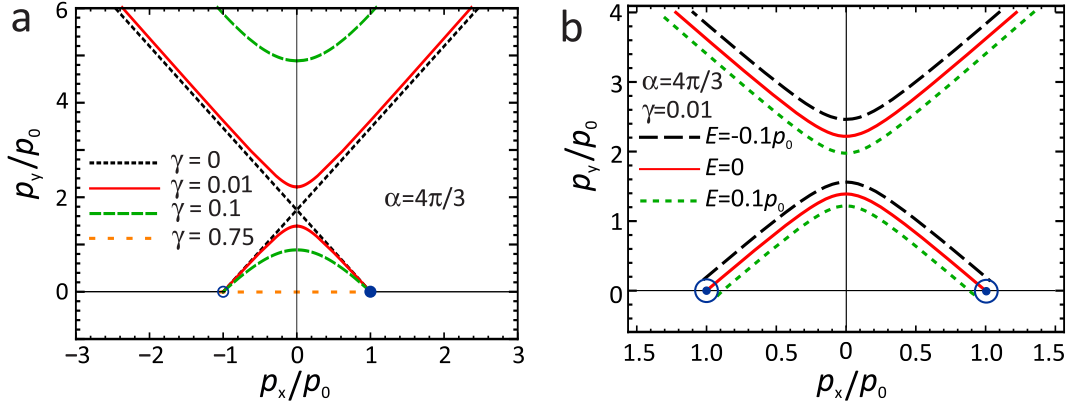


Рис. 3. (а) Ферми-контура поверхностных состояний при $E = 0$ на поверхности (001) вейлевского полуметалла в зависимости от параметра междолинного взаимодействия γ при фиксированном α , для которого ферми-лучи имеют точку пересечения в пределе $\gamma = 0$. (б) Эволюция ферми-контуров при изменении энергии E .

четырёхдолинного приближения. Результаты представлены на Рис. 4.

В **третьей** главе, состоящей из 3 разделов, изучаются интерфейсные эффекты для графеновой антиточки. Известно, что на трансляционно-инвариантном линейном краю графена существуют краевые состояния (КС) [11]. Однако особенность зонной структуры графена состоит в том, что КС всегда сосуществуют с объёмными состояниями, поэтому любое отклонение края от линейности должно приводить к конечности времени жизни КС из-за возможности распада в объём. В разделе **3.1** показано, что уже для шероховатого линейного края графена КС квазистационарны с вероятностью распада в объём $w \sim k_y^4$, где k_y – волновой вектор вдоль края. КС, существующие на круглом нанотверсти в графене, также квазистационарны. Ранее было показано, что в низкоэнергетическом приближении их спектр почти эквидистантен [А6].

В разделе **3.2** рассчитана локальная плотность состояний вблизи единичной антиточки в графене радиусом R , которая поддерживает такие КС. В рамках непрерывной двухзонной модели электроны в каждой долине графена описываются уравнением Вейля-Дирака: $v\sigma\mathbf{r}\psi = E\psi$, где v – скорость Ферми, $\psi = (\psi_1, \psi_2)^T$ – двухкомпонентная волновая функция. Край антиточки описывается однодолинным ГУ [11] $(\psi_1 + ia e^{-i\varphi} \psi_2)|_{at\ edge} = 0$, где a – феноменологи-

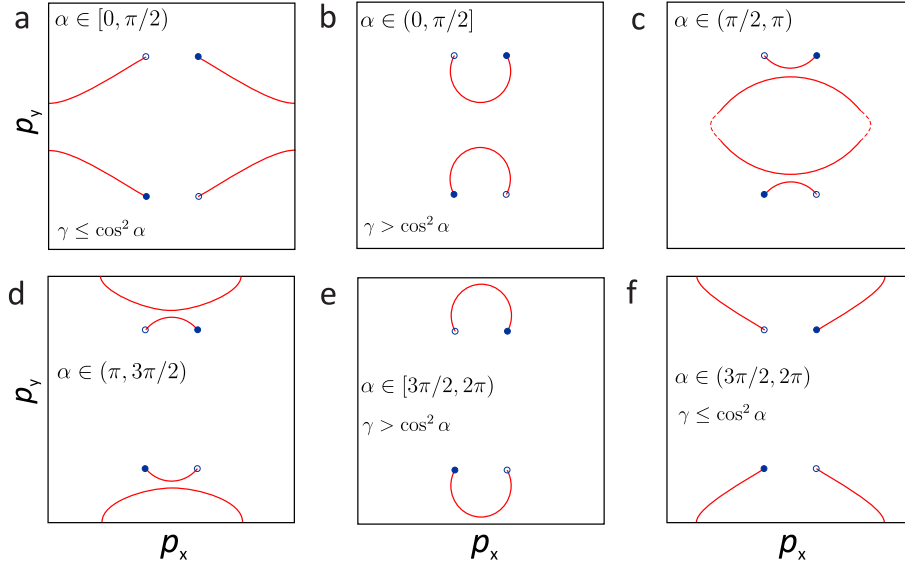


Рис. 4. Схематическое изображение взаимного расположения ферми-контуров при $E = 0$ в четырехдолинном приближении.

ческий параметр, характеризующий структуру края, φ –угол между осью x и нормалью к краю. Получено выражение для локальной плотности состояний

$$\rho(k, r) = \frac{k}{\pi \hbar v} \sum_{l=-\infty}^{\infty} \frac{1}{1 + |B_l(k)|^2} \left[|J_l(kr) + B_l(k)Y_l(kr)|^2 + |J_{l+1}(kr) + B_l(k)Y_{l+1}(kr)|^2 \right], \quad (12)$$

где l – орбитальный угловой момент, $k = -E/\hbar v$ –волновой вектор, $B_l(k) = -[aJ_{l+1}(kR) + J_l(kR)]/[Y_l(kR) + aY_{l+1}(kR)]$, $J_l(x)$, $Y_l(x)$ –функции Бесселя первого и второго рода, соответственно.

Зависимость локальной плотности состояний от энергии имеет резонансный характер (см. Рис. 5). Положение резонансов почти эквидистантно в соответствии со спектром КС, а ширина определяется их временем жизни. При $k < k_0$, где k_0 – волновой вектор состояния с угловым моментом $l_0 = 0$, $a \ll 1$ и $r \sim R$ главный вклад в локальную плотность состояний дают члены с $l = 0, -1$ и $\rho(k, r) \simeq \rho_{free}(k)[1 + R^2/(2a^2r^2)]$, где $\rho_{free}(k) = 2k/(\pi \hbar v)$ –плотности состояний свободных частиц. Когда энергия близка к энергии основного состояния $k \simeq k_0$, высота соответствующего пика $\rho(k_0, r) \simeq [2\rho_{free}(k_0)]/(\pi k_0 r)^2$. Вблизи КС

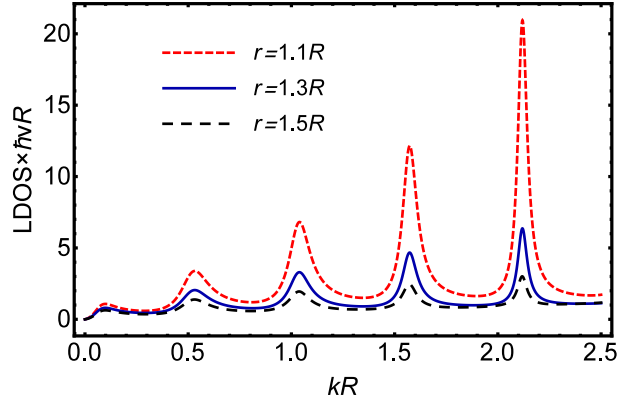


Рис. 5. Зависимость локальной плотности состояний на различных расстояниях r от центра круглого нанотверстия радиусом R от энергии электрона ($k = |E|/\hbar v$) для постоянного граничного параметра $a = -0.3$. Из-за наличия квазистационарных КС, локализованных на антиточке, на фоне плотности состояний свободных частиц $2k/(\pi\hbar v)$ появляются резонансные пики.

с угловым моментом l_0 ($kR \simeq 2|a|l_0 \ll 1$), коэффициент B_{l_0} резонансно велик, а все остальные B_l малы и высота l_0 -ого пика в плотности состояний

$$\rho(k, r) \simeq \frac{\rho_{free}(k)}{\pi^2 k R} \frac{l_0!^2}{(|a|l_0)^{2l_0+1}} \left(\frac{R}{r}\right)^{2l_0+2}. \quad (13)$$

В разделе **3.3** вычисляется спектр КС на заряженной антиточке. Наличие заряда Q в центре антиточки приводит к дополнительному кулоновскому члену $-eQ/r$ в уравнении Вейля-Дирака. В низкоэнергетическом пределе ($kR \ll 1$) и при условиях $la < 0$, $|q| \ll 1$, где $q = eQ/\hbar v$ – безразмерный заряд, спектр КС с $l \neq 0$ определяется выражением

$$kR \simeq -2al + \frac{l}{l+1/2}q + i \frac{|\Gamma(l+1/2-iq)|^2}{8l\Gamma^2(2l)} e^{-\pi q} \left(-4al + \frac{2l}{l+1/2}q\right)^{2l+1}, \quad (14)$$

где $\Gamma(z)$ – гамма-функция. При $l = 0$ действительная часть k определяется как $kR \simeq k_0R - q/[1 + a/(k_0R)]$.

В этом же разделе вычислено сечение рассеяния электронов на заряженной антиточке. Аналогично случаю незаряженного нанотверстия [А3] на зави-

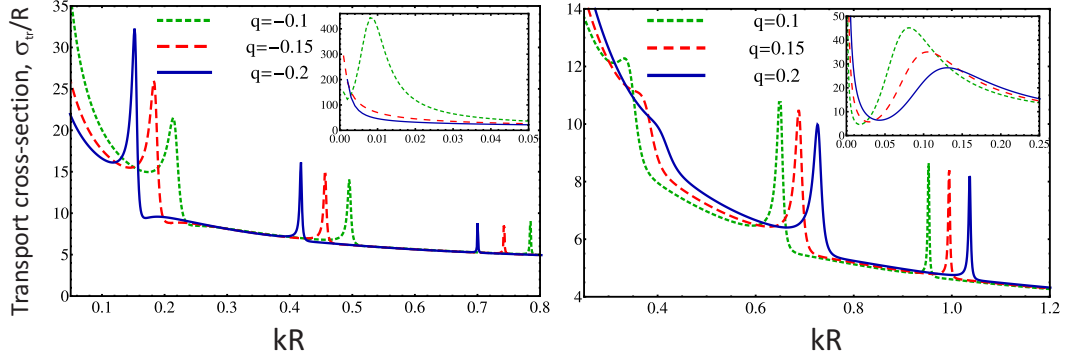


Рис. 6. Зависимость транспортного сечения рассеяния σ_{tr} от энергии при рассеянии на положительно (правая панель, $q > 0$) и отрицательно (левая панель, $q < 0$) заряженной антиточке при $a = -0.15$. Положение и ширина резонансов определяются спектром и временем жизни КС, соответственно.

симости сечения рассеяния от энергии (см. Рис. 6), появляются характерные пики, соответствующие рассеянию на квазистационарных КС. Для отрицательно (положительно) заряженной антиточки эти пики сдвигаются влево (вправо) при увеличении абсолютного значения заряда в соответствии с перенормировкой спектра КС. Ширина пиков, определяемая мнимой частью энергии, также находится в согласии с (14): при $q < 0$ мнимая часть энергии уменьшается с ростом $|q|$ и пики становятся уже; при $q > 0$ мнимая часть энергии растет при увеличении $|q|$ и пики становятся шире.

В **Заключении** сформулированы основные результаты работы:

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 внутридолинными и междолинными 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 внутривалинным и междолинным интерфейсным взаимодействием, ферми-арка может соединять две близкие или удаленные точки зоны Бриллюэна.

7. Рассчитаны особенности локальной плотности состояний, отвечающие крайевым состояниям на антиточке в графене.
8. Вычислены энергетический спектр крайевых состояний и сечение рассеяния электронов на заряженной антиточке в графене. Показано, что энергия крайевых 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 публикаций по теме диссертации

A1. 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. 110-115.

A2. Девизорова Ж. А., Щепетильников А. В., Нефедов Ю. А., Волков В. А., Кукушкин И. В. Интерфейсные вклады в параметры спин-орбитального взаимодействия для электронов на интерфейсе (001) GaAs/AlGaAs // Письма в ЖЭТФ. 2014. Т. 100, № 2. С. 111-117.

A3. Zagorodnev I. V., **Devizorova Zh. A.**, Enaldiev, V. V. Resonant electron scattering by a graphene antidot // Phys. Rev. B. 2015. Vol. 92, no. 19. P. 195413.

A4. **Devizorova Zh. A.**, Volkov V. A. Fermi arcs formation in Weyl semimetals: The key role of intervalley interaction // Phys. Rev. B. 2017. Vol. 95, no. 8. P. 081302(R).

A5. Девизорова Ж. А., Волков В. А. Спиновое расщепление электронного спектра в несимметричных гетероструктурах: вклад атомарно резкого интерфейса // Нелинейный мир. 2014. Т. 12, С. 72.

A6. **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.

A7. **Девизорова Ж. А.**, Волков В. А. Граничные условия и спектр поверхностных состояний в Вейлевском полуметалле // Нелинейный мир. 2017. Т. 15, С. 16.

A8. **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.

A9. **Девизорова Ж. А.**, Волков В. А. Нелинейное и анизотропное спиновое расщепление электронных уровней Ландау в GaAs-наноструктурах // Труды МФТИ. 2014. Т. 6, С. 39.

A10. **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.

A11. **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.

A12. **Девизорова Ж. А.**, Волков В. А. Вклад гетероинтерфейса GaAs/AlGaAs в спиновое расщепление спектра 2D-электронов // Сборник трудов 19-го Международного симпозиума "Нанофизика и нанoeлектроника". 2015. Т.2, С. 481.

A13. **Devizorova Zh. A.**, Zagorodnev I. V., Enaldiev V. V., Volkov V.A. 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.

A14. **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.

A15. 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.

A16. **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 полупроводников. 2015. С. 313.

A17. Загороднев И.В., **Девизорова Ж. А.**, Еналдиев В.В., Фролов А.В., Волков В. А. Рассеяние электронов в графене на круглом нанотверстии // Тезисы докладов 12-ой Российской конференции по физике полупроводников. 2015. С. 255.

A18. Zagorodnev I. V., **Devizorova Zh. A.**, Enaldiev V. V., Frolov A.V., Volkov V.A. A possible manifestaion of edge states in graphene // Book of Abstracts. Graphene Week. 2016. P. 229.

A19. **Devizorova Zh.**, Zagorodnev I., Enaldiev V. Resonant electron scattering by a graphene antidot // Book of Abstracts. Graphene Week. 2016. P. 411.

A20. **Девизорова Ж. А.**, Волков В. А. Формирование Ферми-арки в Вейлевском полуметалле: ключевая роль междолинного взаимодействия // Сборник трудов 21-го Международного симпозиума "Нанозифика и наноэлектроника". 2017. С. 573.

A21. 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.

Цитированная литература

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. 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.
5. Winkler R. Spin-orbit Coupling Effects in Two-dimensional Electron and Hole Systems. Springer, Berlin, 2003.
6. Ivchenko E. L., Kiselev A. A. Electron g factor of quantum wells and superlattices // Soviet physics. Semiconductors. 1992. Vol. 26., no. 8. P. 827.
7. Kalevich V. K., Korenev V. L. Electron g -factor anisotropy in asymmetric GaAs/AlGaAs quantum well //JETP Letters. 1993. Vol. 57. P. 571.
8. Lommer G., Malcher F., Rossler U. Reduced g factor of subband Landau levels in AlGaAs/GaAs heterostructures //Phys. Rev. B. 1985. Vol. 32, no. 10. P. 6965.
9. 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.
10. Li S., Andreev A. V. Spiraling Fermi arcs in Weyl materials // Phys. Rev. B. 2015. Vol. 92, no. 20. P. 201107.
11. Волков В. А., Загороднев И. В. Электроны вблизи края графена // ФНТ. 2009. Т. 35, № 1. С. 5.

