

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК
ЖУРНАЛ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ
И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

ОСНОВАН В МАРТЕ 1873 ГОДА

ТОМ 162, ВЫПУСК 4 (10)

ВЫХОДИТ 12 РАЗ В ГОД

ОКТАБРЬ 2022

МОСКВА

«НАУКА»

ЖУРНАЛ ИЗДАЕТСЯ ПОД РУКОВОДСТВОМ ОТДЕЛЕНИЯ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК РАН

СОДЕРЖАНИЕ

Macroscopic quantum tunneling: from quantum vortices to black holes and Universe . . . Volovik G. E.	449
Conductivity of two-dimensional small gap semiconductors and topological insulators in strong Coulomb disorder Huang (黄奕) Yi, Shklovskii B. I., Skinner Brian	455
Weak localization in p -type heterostructures in the presence of parallel magnetic field Nestoklon M. O., Golub L. E.	463
Spin and valley effects on the quantum phase transition in two dimensions Shashkin A. A., Kravchenko S. V.	466
Влияние угловой симметрии возбуждающего светового пучка на динамику микрорезонаторных экситонных поляритонов в туннельно-связанных потенциальных ловушках Деменев А. А., Кулаковский В. Д., Терешко С. Н., Гиппиус Н. А.	471
Перенормировка спектра возбуждений и эффект Мигдала в двумерной электронной системе с сильным взаимодействием Кукушкин И. В.	480
Магнитоэкситонный конденсат в холловском диэлектрике . . Горбунов А. В., Тимофеев В. Б.	492
Адиабатический потенциал ян-теллеровских комплексов $\text{Cu}^{2+}\text{F}_8^-$ в кристалле флюорита Сарычев М. Н., Хоссени У. А. Л., Жевстовских И. В., Уланов В. А., Егранов А. В., Суриков В. Т., Аверкиев Н. С., Гудков В. В.	509
Мультифрактально-усиленная сверхпроводимость в двумерных системах со спин-орбитальным взаимодействием Андрияхина Е. С., Бурмистров И. С.	522
Особенности физических наблюдаемых сильно коррелированной сверхпроводящей нанопроволоки со спин-орбитальным взаимодействием Рашба Шустин М. С., Аксенов С. В.	541
Momentum alignment and the optical valley Hall effect in low-dimensional Dirac materials Saroka V. A., Hartmann R. R., Portnoi M. E.	555
Spin-dependent electron–electron interaction in Rashba materials . . . Gindikin Y., Sablikov V. A.	564

© Российская академия наук, 2022

© Редакция журнала ЖЭТФ (составитель), 2022

Расщепление дираковских состояний в квантовых ямах HgTe. Роль кристаллографической ориентации, интерфейсной, объемной и структурной асимметрии	570
..... Дурнев М. В., Будкин Г. В., Тарасенко С. А.	
Collective spin modes in Fermi liquids with spin-orbit coupling Maslov D. L., Kumar A., Maiti S.	580
Влияние давления на электронную зонную структуру и циркулярный фототок в теллуре	584
..... Глазов М. М., Ивченко Е. Л., Нестоклон М. О.	
Биения осцилляций Шубникова – де Гааза в двумерных электронных системах со снятым спиновым вырождением	598
..... Дорожкин С. И.	
The Rashba splitting in SmB ₆	
..... Rader O., Hlawenka P., Siemensmeyer K., Weschke E., Varykhalov A., Sánchez-Barriga J., Shitsevalova N. Y., Filipov V. B., Gabáni S., Flachbart K., Rienks E. D. L.	608

EDN: EMHLLY



Фото из семейного архива Э. И. Рашба,
предоставлено Юлией Рашба-Степ

К 95-летию Эммануила Иосифовича Рашба

ОТ РЕДАКЦИИ

В этом выпуске ЖЭТФ опубликованы статьи, написанные коллегами, учениками и друзьями выдающегося физика-теоретика Эммануила Иосифовича Рашба в честь его 95-летия. Большое число результатов многолетней исследовательской работы юбиляра знаменовало важные достижения физики конденсированного состояния. Во всём мире широко известны его работы о физике полупроводников и полупроводниковых приборов, об экситонах в полупроводниках и молекулярных кристаллах, о поляронах и многом другом. В результате, если на семинаре или конференции упоминается «эффект Рашба», то требуется дополнительное обсуждение, чтобы понять идёт ли речь о гигантской силе осцилляторов для связанных экситонов или об электро-дипольных переходах с переворотом спина. Эффекты спин-орбитального взаимодействия: от ранних работ о «комбинированном» резонансе до недавней публикации о гигантском спиновом расщеплении в антиферромагнетике — оказались самой долгоживущей темой исследований юбиляра. Шесть лет назад под заголовком “Spin – orbit coupling goes global” Э.И. опубликовал Viewpoint, в котором описал беспрецедентное тематическое расширение фронта фундаментальных исследований физических явлений связанных со спин-орбитальным взаимодействием и перспективы применений результатов этих исследований в технике. Научная деятельность Э. И. Рашба тесно связана с ЖЭТФ: многие его работы опубликованы на страницах нашего журнала, Эммануил Иосифович был членом легендарной первой редколлегии Писем в ЖЭТФ в годы, когда этот журнал отделился от ЖЭТФ. Редакция благодарит всех авторов этого выпуска и вместе с ними поздравляет Эммануила Иосифовича со знаменательной датой, желает ему здоровья и творческих успехов.

EDITORIAL

This issue of JETP contains papers, submitted by the colleagues, disciples and friends of the distinguished theoretical physicist Emmanuel Rashba on occasion of his 95th birthday. The research career of Prof Rashba has resulted in a large number of important contributions to condensed matter physics. His papers on theoretical and applied physics of semiconductors, on the theory of excitons in semiconductors and molecular crystals, on polarons, etc are recognised worldwide. As the result of this diversity, the term “Rashba effect” means to different experts either gigantic oscillators force for bound excitons or the spin-flip electro-dipole transition. The study of effects caused by spin-orbital coupling — from an early prediction of “combined” resonance to recent publication on gigantic spin splitting in anti-ferromagnets — turns out to be a permanent subject of his research. Six years ago, Prof Rashba published, under the title “Spin-orbit coupling goes global”, his Viewpoint, in which he outlined an unprecedented broadening of fundamental research in all spin-orbit related branches of physics and the hopes concerned with applications of the results in modern technology. For a long time, Prof E. I. Rashba was an active contributor to JETP. He was also a member of the legendary first team of editors of JETP Letters when this journal split off from JETP. The editors are grateful to all the authors of this issue and, together with them, congratulate Emmanuel on his very special birthday and wish him good health and further success.

MACROSCOPIC QUANTUM TUNNELING: FROM QUANTUM VORTICES TO BLACK HOLES AND UNIVERSE

G. E. Volovik^{a,b*}

^a *Low Temperature Laboratory, Aalto University
FI-00076 Aalto, Finland*

^b *Landau Institute for Theoretical Physics
142432, Chernogolovka, Moscow region, Russia*

Received August 1, 2021,
revised version August 15, 2021
Accepted August 17, 2021

Contribution for the JETP special issue in honor of E. I. Rashba's 95th birthday

DOI: 10.31857/S0044451022100017

EDN: EMRXSG

The process of quantum tunneling of macroscopic objects is well known in condensed matter physics, where the collective variables are used, which describe the collective dynamics of a macroscopic body [1–3]. This approach allows estimating the semiclassical tunneling exponent without consideration of the details of the object structure on the microscopic (atomic) level.

One of the applications of the macroscopic quantum tunneling is the calculation of the quantum creation of the topological objects. Examples are the nucleation quantized vortices in moving superfluids [4], nucleation of Abrikosov vortices in superconductors in the presence of supercurrent [5], and the instanton — the process of creation of the topological charge in quantum field theories [6]. In the process of quantum nucleation of the vortex ring with radius R (a vortex instanton) the collective (macroscopic) dynamically conjugate variables are represented by the area $A = \pi R^2$ of the created vortex ring and (with some factor) its coordinate z along the normal to the ring.

It looks reasonable to apply the approach of macroscopic quantum tunneling also to such macroscopic objects as a black hole. In this case the corresponding collective variables [7] are the area of the event horizon $A = 4\pi R^2$ and its dynamically conjugate variable — the gravitational coupling K (we use the gravitational coupling $K = 1/(4G)$, where G is the Newton “constant”).

Since in both cases one of the collective variables is represented by the corresponding area, this suggests that there can be some thermodynamic analogy between the vortex ring and the black hole. It was shown in Ref. [8] that quantized vortices in Fermi superfluids have many common properties with the black holes. In particular, there is an analog of the Hawking temperature for the moving vortex ring, see Eq. (4.1.9) in Ref. [8]:

$$T_H = \frac{\hbar v_F}{4\pi R} \ln \frac{R}{r_c}, \quad (1)$$

where v_F is Fermi velocity, and r_c is the radius of the singularity — the vortex core radius. In Fermi superfluids, the core size is the analog of the Planck length, which determines singularity inside the black hole.

The temperature in Eq. (1) looks similar to the Hawking temperature of black holes:

$$T_H = \frac{\hbar c}{4\pi R}. \quad (2)$$

The analogy with black holes is supported by the behavior of fermionic quasiparticles living in the vortex core. They occupy bound states: the Caroli–de Gennes–Matricon states [9]. Due to the motion of the vortex ring, the fermions are excited from the bound states to the continuous spectrum by the process of quantum tunneling. The tunneling exponent reproduces the thermal nucleation with the analog of Hawking temperature in Eq. (1). If to extend this analogy to the black hole, then the Hawking radiation from the black hole can be considered as the quantum tunneling of particles from the bound state inside the black hole singularity

* E-mail: grigori.volovik@aalto.fi

to the continuous spectrum outside the event horizon. The Hawking radiation as semiclassical tunneling was considered in Refs. [10–14] and in many following papers.

The analogy between the vortex rings in Fermi superfluids with their fermion zero modes in the vortex core and the black hole concerns both the individual processes of the particle creation by quantum tunneling from the object to the external world and the related process of macroscopic quantum tunneling of the whole macroscopic object. In this paper, we discuss the processes of microscopic and macroscopic quantum tunneling related to the black hole and de Sitter Universe using experience with the objects in condensed matter, where we know physics both on macro and micro scales. The plan of the paper is the following.

In Sec. II of the full text, we consider the macroscopic quantum tunneling of the Schwarzschild black hole to the Schwarzschild white hole of the same mass using inverse Newton constant $K = 1/4G$ as dynamic and thermodynamic variable. Introduction of the varying K modifies the first law for the Schwarzschild black hole thermodynamics:

$$dS_{BH} = -AdK + \frac{dM}{T_{BH}},$$

where M is the black hole mass, $A = 4\pi R^2$ is the area of horizon, and T_{BH} is Hawking temperature in Eq. (2). From this first law, it follows that the dimensionless quantity M^2/K is the adiabatic invariant, which in principle can be quantized if to follow the Bekenstein conjecture [15].

As in the case of the semiclassical consideration of the Hawking radiation in terms of the quantum tunneling, we shall use the Painlevé–Gullstrand coordinate system [16, 17] with the metric

$$ds^2 = -dt^2(1 - \mathbf{v}^2) - 2dt \, d\mathbf{r} \cdot \mathbf{v} + d\mathbf{r}^2. \quad (3)$$

Here the vector $v_i(\mathbf{r}) = g_{0i}(\mathbf{r})$ is the shift velocity — the velocity of the free-falling observer, who crosses the horizon. In condensed matter, the analog of this metric is the so-called acoustic metric [18] emerging for quasiparticles in moving superfluids, where the shift velocity v_i is played by superfluid velocity. The analogs of the black hole and white hole horizons described by this metric can be also reproduced in the Dirac and Weyl topological semimetals, where the horizon takes place on the boundary between different types of Dirac or Weyl materials [19–21]. For the Schwarzschild black hole one has

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}) = \mp \hat{\mathbf{r}} \sqrt{\frac{M}{2rK}} = \mp \hat{\mathbf{r}} \sqrt{\frac{2MG}{r}}, \quad (4)$$

where sign “–” is for a black hole (flow in), and sign “+” is for a white hole (flow out). For the fully static black hole, $\mathbf{v} = 0$ (no flow).

From the Euclidean action for the black hole, it follows that K and A serve as dynamically conjugate variables. The quantum tunneling exponent is usually determined by the imaginary part of the action on the classical trajectory $A(K)$, which transforms the black hole to white hole at fixed $M = \text{const}$:

$$p \propto \exp(-I_{BH \rightarrow WH}),$$

$$I_{BH \rightarrow WH} = \int_C A(K') dK'. \quad (5)$$

Along this trajectory, the variable K' changes from K to the branch point at $K' = \infty$, and then from $K' = \infty$ to $K' = K$ along the other branch, where the area $A(K') < 0$. The integral gives the tunneling exponent of the transition from the black hole to the white hole with the same mass M :

$$I_{BH \rightarrow WH} = 2\pi M^2 \int_K^\infty \frac{dK'}{K'^2} = 2\pi \frac{M^2}{K}. \quad (6)$$

The tunneling exponent in Eq. (6) can be expressed in terms of the black hole entropy $S_{BH} = A/4G$, and it is twice the black hole entropy, which enters the probability of transition:

$$p \propto \exp(-2\pi M^2/K) = \exp(-2S_{BH}). \quad (7)$$

The factor 2 has the important consequence. The quantum tunneling can be considered as random thermodynamic fluctuation, and the latter can be expressed in terms of the difference in entropy before and after transition [22]. This suggests that $p \propto \exp(S_{WH} - S_{BH})$, and thus from Eq. (7) one has $S_{WH} - S_{BH} = -2S_{BH}$, i. e., the entropy of the white hole is with minus sign the entropy of the black hole:

$$S_{WH}(M) = -S_{BH}(M) = -\frac{A}{4G}. \quad (8)$$

Then one obtains that the temperature of the white hole is also negative.

While the negative temperatures is the well known phenomenon, the negative entropy looks strange. Anyway, the black hole states with negative entropy have been considered in Ref. [23], where it has been suggested that appearance of negative entropy may indicate a new type instability, see also Ref. [24]. Such super-low entropy of white hole can be also seen as an example of a memory effect discussed in Ref. [25], i. e. the entropy of the white hole is negative, since this state

remembers that it is formed from the black hole by the quantum tunneling.

Here we show that there are different ways to calculate the entropy of the white hole, and all of them support its negative sign.

In Sec. III of the full text, we use the following way of calculations. We consider three different types of the hole objects: black hole, white hole, and the fully static intermediate state. The probability of tunneling transitions between these three macroscopic states is found using singularities in the coordinate transformations between these objects. The black and white holes are described by the Painlevé–Gullstrand coordinates with opposite shift vectors in Eq. (4), while the intermediate state is described by the static Schwarzschild coordinates with $\mathbf{v} = 0$. The singularities in the coordinate transformations lead to the imaginary part in the action, which determines the tunneling exponent. For the white hole the same negative entropy is obtained, while the intermediate state — the fully static hole — has zero entropy.

In Sec. IV of the full text, we consider the electrically charged black hole, the Reissner–Nordström (RN) black hole with two horizons, inner and outer. We calculated the entropy of RN black hole and the corresponding temperature of the thermal Hawking radiation using several different approaches. These are:

(i) The method of semiclassical tunneling, which is used for calculation of the Hawking temperature.

(ii) The cotunneling mechanism — the coherent sequence of tunneling at two horizons, each determined by the corresponding Hawking temperature.

(iii) The calculation of the macroscopic quantum tunneling from the RN black hole to the RN white hole using the method of singular coordinate transformations.

(iv) The adiabatic change of the fine structure constant α to zero. This adiabatic process transforms the RN black hole to the Schwarzschild black hole, which does not contradict to the conservation of the charge Q . When α slowly decreases to zero, the two horizons move slowly with conservation of the charge number Q and mass M . Finally, the inner horizon disappears and the black hole at $\alpha = 0$ becomes neutral. In such slow process, the entropy does not change and is the same as the entropy of the neutral black hole. Since the states with different Q can be obtained by the adiabatic transformations, this suggests that entropy of the RN black hole does not depend on charge Q . This is supported by the other approaches, which give the same result.

So, the correlations between the inner and outer horizons lead to the total entropy and to the tem-

perature of Hawking radiation, which depend only on mass M of the black hole and do not depend on the black hole charge Q :

$$S_{BH}(Q, M) = S_{BH}(Q = 0, M). \quad (9)$$

This deviation from the conventional area law can be ascribed to the correlated contributions of both horizons to entropy.

The full agreement between the results of different approaches confirms the validity of the methods used in this paper. In particular, this demonstrates that some singular coordinate transformations violate the general covariance in general relativity: they transform the initial state to the physically (thermodynamically) different state. This corresponds to the spontaneously broken symmetry with respect to the general coordinate transformations, which leads to the existence of the non-equivalent degenerate states with the same energy (black hole and white hole). While the physical laws are invariant under the singular coordinate transformations, the degenerate states are not: they transform into each other under these transformations.

All this also supports the statement that the (anti)symmetry between the black and white holes can be extended to their entropy and temperature. The Schwarzschild black hole and the Schwarzschild white hole are described by the metrics with opposite shift vectors. The shift vector changes sign under time reversal, which transforms a black hole into a white hole. The absence of the time reversal invariance for each of these holes makes these states non-static, but still the metric is stationary (time independent), and thus the entropy and temperature can be well defined. The Schwarzschild black hole and the Schwarzschild white hole have the opposite entropies, $S_{WH}(M) = -S_{BH}(M)$, and the opposite Hawking temperatures, $T_{WH}(M) = -T_{BH}(M)$. For the intermediate static hole with $\mathbf{v} = 0$ the time reversal symmetry is not violated, and this object has zero temperature and zero entropy, $S_{static} = T_{static} = 0$.

It is interesting to consider the other objects including the Kerr black and white holes, where time reversal symmetry is violated by rotation. In this case, the coordinate transformations produces the singularity in action not only in $\int M dt$, but also in $\int J d\phi$, where J is angular momentum and ϕ is the polar coordinate. The proper coordinate system can be found in Refs. [26, 27]. The recent discussion of the Painlevé–Gullstrand forms and their extensions can be found in Refs. [28, 29]. In Ref. [30], the entropy of the Kerr black hole was obtained using the method of the adiabatic transformation. The result is similar to that for

the RN black hole: the entropy depends only on the mass M of the black hole:

$$S_{BH}(J, M) = S_{BH}(J = 0, M). \quad (10)$$

The consideration can be extended to the other black holes with several horizons [31–33], in particular to the Reissner–Nordström–de Sitter black hole with the cosmological event horizon. In Ref. [32], the entropy of the Reissner–Nordström black hole in Eq. (9) is reproduced in the asymptotic limit of infinite cosmological horizon.

In Sec. V of the full text, the entropy and temperature of the expanding de Sitter Universe are considered. We show that as distinct from the black hole physics, the de Sitter thermodynamics is not determined by the cosmological horizon. The effective temperature of the de Sitter spacetime differs from the conventional Hawking temperature $T_H = H/2\pi$, which follows from the formal semiclassical calculation of the tunneling rate across the cosmological horizon (H is the Hubble parameter). In particular, atoms in the de Sitter Universe experience thermal activation corresponding to the local temperature, which is twice larger than the Hawking temperature, $T_{loc} = 2T_H = H/\pi$ [34]. The same double Hawking temperature describes the decay of massive scalar field in the de Sitter Universe [35–37].

The quantum tunneling process, which leads to the decay of the composite particle in the de Sitter vacuum, occurs fully inside the cosmological horizon and is fully determined by the local temperature T_{loc} . The unconventional thermodynamics of the de Sitter vacuum follows from the specific geometry of the de Sitter expansion and is not related to the existence of the cosmological horizon. The weakening of the role of the cosmological horizon in the de Sitter Universe is confirmed by the proper consideration of the Hawking radiation, and macroscopic quantum tunneling. The free energy of the fluctuations of the matter fields also corresponds to the local temperature T_{loc} . It is not restricted by the region inside the horizon, i. e., it is also not related to the existence of the cosmological horizon. All this raises the question of the role of the cosmological horizon and Hawking temperature in the pure de Sitter vacuum.

The decay of the composite particles, which are excitations above the de Sitter vacuum, does not directly lead to the decay of the vacuum itself. However, it is instructive to consider the de Sitter state as the thermodynamic state, which contains the thermal matter with the local temperature T_{loc} . Then the interaction between the thermal matter and the dark energy during the evolution of the Universe leads to the decay of

the vacuum energy density ρ_V and of the Hubble parameter H according to the following power law [38]:

$$H \sim E_{Pl} \left(\frac{t_{Pl}}{t} \right)^{1/3}, \quad (11)$$

$$\rho_V \sim E_{Pl}^4 \left(\frac{t_{Pl}}{t} \right)^{2/3}. \quad (12)$$

Here the Planck time $t_{Pl} = G^{1/2}$ and Planck energy $E_{Pl} = 1/t_{Pl}$ are introduced. Such power law decay is discussed in different approaches. It is similar to that in Eq. (192) in Ref. [39] (see also Ref. [40]) and in Eq. (109) in Ref. [41]. The time scale of the decay of the de Sitter expansion, which follows from Eq. (12), $t_Q = E_{Pl}^2/H^3$, corresponds to the time at which de Sitter state loses coherence [42].

On the other hand, the possibility of the decay of the pure de Sitter vacuum due to Hawking radiation remains unclear and requires the further consideration [43]. This does not mean that the de Sitter vacuum is stable: this only means that the Hawking radiation alone does not lead to instability, i. e. the de Sitter vacuum is stable with respect to the decay via the Hawking radiation. The Hawking radiation does not lead to the change of the vacuum energy density, which generates the de Sitter expansion. This means that even if the pair creation takes place, the de Sitter expansion immediately dilutes the produced particles, and thus there is no vacuum decay in the de Sitter spacetime.

There are many other mechanisms, not related to the Hawking radiation, which could lead to the decay of the de Sitter spacetime [44–51], including the infrared instability, instability due to the dynamic effects of a certain type of quantum fields, instability towards spontaneous breaking of the symmetry of the de Sitter spacetime or the instability towards the first order phase transition in the vacuum, etc. But in most cases, either the de Sitter vacuum is not perfect, i. e., there are deviations from the exact de Sitter and the de Sitter symmetry is lost, or the vacuum energy is fine-tuned, i. e., the cosmological constant problem is ignored. The de Sitter instability, which avoids fine tuning, but uses the special vector field in Dolgov scenario [52], is in Ref. [53].

The problem of the dynamical stability of the de Sitter vacuum is directly related to the cosmological constant problem. The q -theory [54] demonstrates the solution of the problem in thermodynamics: in the equilibrium Minkowski vacuum the cosmological constant is nullified due to thermodynamics. However, it remains unclear whether the de Sitter state relaxes to the equilibrium. This depends on the stability of the de Sitter vacuum. If the de Sitter attractor is not excluded in dy-

namics, then the only possibility to solve the dynamical cosmological problem within the q -theory is to assume that the Big Bang occurred in the part of the Universe, which is surrounded by the equilibrium environment [55]. In this case, any perturbation of the vacuum energy by the Big Bang, even of the Planck scale order, will inevitably relax to the equilibrium Minkowski vacuum with zero cosmological constant. This relaxation does not require any fine-tuning, since it is dictated by the equilibrium environment.

In conclusion, the macroscopic quantum tunneling elaborated in the early works by S. V. Iordansky, A. M. Finkel'shtein, and E. I. Rashba in Landau Institute allows studying similar processes in cosmology. The probability of the processes of macroscopic quantum tunneling of cosmological objects is extremely small. However, the theoretical consideration of these processes allows making conclusions on entropy and temperature of the cosmological objects, which are rather unexpected.

Funding. This work has been supported by the European Research Council (ERC) under the European Union's Horizon 2020 research and innovation programme (Grant Agreement No. 694248).

The full text of this paper is published in the English version of JETP.

REFERENCES

1. I. M. Lifshitz and Yu. Kagan, *JETP* **35**, 206 (1972).
2. S. V. Iordanskii and A. M. Finkel'shtein, *JETP* **35**, 215 (1972).
3. S. V. Iordanskii and E. I. Rashba, *JETP* **47**, 975 (1978).
4. G. E. Volovik, *JETP Lett.* **15**, 81 (1972).
5. G. Blatter, M. V. Feigelman, V. B. Geshkenbein, A. I. Larkin, and V. M. Vinokur, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 1125 (1994).
6. A. A. Belavin, A. M. Polyakov, A. S. Schwartz, and Yu. S. Tyupkin, *Phys. Lett. B.* **59**, 85 (1975).
7. G. E. Volovik, *Universe* **6**, 133 (2020).
8. G. E. Volovik, gr-qc/9510001.
9. C. Caroli, P. G. de Gennes, and J. Matricon, *Phys. Lett.* **9**, 307 (1964).
10. M. K. Parikh and F. Wilczek, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 5042 (2000).
11. K. Srinivasan and T. Padmanabhan, *Phys. Rev. D* **60**, 024007 (1999).
12. G. E. Volovik, *JETP Lett.* **69**, 705 (1999).
13. E. T. Akhmedov, V. Akhmedova, and D. Singleton, *Phys. Lett. B* **642**, 124 (2006).
14. L. Vanzo, G. Acquaviva, and R. Di Criscienzo, *Class. Quant. Grav.* **28**, 183001 (2011).
15. J. D. Bekenstein, *Lett. Nuovo Cim.* **11**, 467 (1974).
16. P. Painlevé, *C. R. Acad. Sci. (Paris)* **173**, 677 (1921).
17. A. Gullstrand, *Arkiv. Mat. Astron. Fys.* **16**, 1 (1922).
18. W. Unruh, *Phys. Rev. Lett.* **46**, 1351 (1981).
19. G. E. Volovik, *JETP Lett.* **104**, 645 (2016).
20. G. E. Volovik and K. Zhang, *J. Low Temp. Phys.* **189**, 276 (2017).
21. Y. Kedem, E. J. Bergholtz, and F. Wilczek, *Phys. Rev. Res.* **2**, 043285 (2020).
22. L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Course of Theoretical Physics*, Vol. 5, *Statistical Physics*, Elsevier, Amsterdam (2013).
23. M. Cvetič, S. Nojiri, and S. D. Odintsov, *Nucl. Phys. B* **628**, 295 (2002).
24. G. G. L. Nashed, W. El Hanafy, S. D. Odintsov, and V. K. Oikonomou, *Int. J. Mod. Phys. D* **29**, 1750154 (2020).
25. C. Rovelli, arXiv:2003.06687.
26. C. Doran, *Phys. Rev. D*, **61**, 067503 (2000).
27. A. J. S. Hamilton and J. P. Lisle, *Amer. J. Phys.* **76**, 519 (2008).
28. V. Faraoni and G. Vachon, *Eur. Phys. J. C* **80**, 771 (2020).
29. J. Baines, T. Berry, A. Simpson, and M. Visser, *Universe* **8**, 115 (2022).
30. G. E. Volovik, *Mod. Phys. Lett. A* **36**, 2150177 (2021).
31. S. Shankaranarayanan, *Phys. Rev. D* **67**, 084026 (2003).
32. C. Singha, *Gen. Rel. Grav.* **54**, 38 (2022).
33. S. Azarnia and S. Sedigheh Hashemi, arXiv:2111.08984.

34. G. E. Volovik, JETP Lett. **90**, 1 (2009).
35. J. Bros, H. Epstein, and U. Moschella, JCAP 0802:003 (2008).
36. J. Bros, H. Epstein, M. Gaudin, U. Moschella, and V. Pasquier, Comm. Math. Phys. **295**, 261 (2010).
37. D. P. Jatkar, L. Leblond, and A. Rajaraman, Phys. Rev. D **85**, 024047 (2012).
38. G. E. Volovik, arXiv:2007.05988.
39. T. Padmanabhan, Phys. Rep. **380**, 235 (2003).
40. Jinn-Ouk Gong and Min-Seok Seo, JCAP **10**, 042 (2021).
41. T. Markkanen, Eur. Phys. J. C **78**, 97 (2018).
42. L. Berezhiani, G. Dvali and O. Sakhelashvili, Phys. Rev. D **105**, 025022 (2022).
43. A. Yu. Kamenshchik, A. A. Starobinsky, and T. Vardanyan, Eur. Phys. J. C **82**, 345 (2022).
44. Ya. B. Zeldovich and A. A. Starobinsky, JETP Lett. **26**, 252 (1977).
45. A. A. Starobinskii, JETP Lett. **30**, 682 (1979).
46. A. A. Starobinskii, JETP Lett. **37**, 66 (1983).
47. A. Starobinsky and J. Yokoyama, Phys. Rev. D **50**, 6357 (1994).
48. A. M. Polyakov, Nucl. Phys. B **797**, 199 (2008).
49. A. M. Polyakov, arXiv:1209.4135 [hep-th].
50. E. T. Akhmedov, Int. J. Mod. Phys. **23**, 1430001 (2014).
51. E. Palti, Fortschr. Phys. **67**, 1900037 (2019).
52. A. D. Dolgov, Phys. Rev. D **55**, 5881 (1997).
53. V. Emelyanov and F. R. Klinkhamer, Phys. Rev. D **86**, 027302 (2012).
54. F. R. Klinkhamer and G. E. Volovik, Phys. Rev. D **78**, 063528 (2008).
55. F. R. Klinkhamer, O. Santillan, G. E. Volovik, and A. Zhou, Physics **1**, 321 (2019).

CONDUCTIVITY OF TWO-DIMENSIONAL SMALL GAP SEMICONDUCTORS AND TOPOLOGICAL INSULATORS IN STRONG COULOMB DISORDER

Yi Huang (黄奕)^{a*}, B. I. Shklovskii^a, Brian Skinner^b

^a School of Physics and Astronomy, University of Minnesota
Minneapolis, Minnesota 55455, USA

^b Department of Physics, The Ohio State University, Columbus
Ohio 43202, USA

Received May 29, 2022,
revised version May 29, 2022
Accepted June 1, 2022

We are honored to dedicate this article to Emmanuel Rashba on the occasion of his 95 birthday. In the ideal disorder-free situation, a two-dimensional band gap insulator has an activation energy for conductivity equal to half the band gap, Δ . But transport experiments usually exhibit a much smaller activation energy at low temperature, and the relation between this activation energy and Δ is unclear. Here we consider the temperature-dependent conductivity of a two-dimensional narrow gap semiconductor on a substrate containing Coulomb impurities, mostly focusing on the case when amplitude of the random potential $\Gamma \gg \Delta$. We show that the conductivity generically exhibits three regimes and only the highest temperature regime exhibits an activation energy that reflects the band gap. At lower temperatures, the conduction proceeds through nearest-neighbor or variable-range hopping between electron and hole puddles created by the disorder. We show that the activation energy and characteristic temperature associated with these processes steeply collapse near a critical impurity concentration. Larger concentrations lead to an exponentially small activation energy and exponentially long localization length, which in mesoscopic samples can appear as a disorder-induced insulator-to-metal transition. We arrive at a similar disorder driven steep insulator–metal transition in thin films of three-dimensional topological insulators with very large dielectric constant, where due to confinement of electric field internal Coulomb impurities create larger disorder potential. Away from neutrality point this unconventional insulator-to-metal transition is augmented by conventional metal–insulator transition at small impurity concentrations, so that we arrive at disorder-driven re-entrant metal–insulator–metal transition. We also apply this theory to three-dimensional narrow gap Dirac materials.

Contribution for the JETP special issue in honor of E. I. Rashba's 95th birthday

DOI: 10.31857/S0044451022100029

EDN: EMVOJE

1. INTRODUCTION

In a band gap insulator, charged impurities often play a decisive role in determining the properties of the insulating state. Due to the long-ranged nature of the Coulomb potential that they create, such impurities produce large band bending that changes qualitatively the nature of electron conduction relative to the ideal

disorder-free situation. An illustrative case is that of a three-dimensional completely-compensated semiconductor, for which positively-charged donors and negatively-charged acceptors are equally abundant and randomly distributed in space. In this case, the impurity potential has large random fluctuations, which can be screened only when the amplitude of this potential reaches Δ , where 2Δ is the band gap. This screening is produced by sparse electron and hole droplets, concentrated in spatially alternating electron and hole clouds (puddles) [1–3] (see Fig. 1). At high enough temperatures the electrical conductivity is due to activation of electrons and holes from the Fermi level to the energy

* E-mail: huan1756@umn.edu

associated with classical percolation across the sample. At lower temperatures the conductivity is due to hopping between nearest neighbor puddles (NNH). At even smaller temperatures it is due to variable range hopping (VRH) between puddles. Crucially, in each of these temperature regimes the naive relation $E_a = \Delta$ is lost, where E_a is the activation energy for conductivity. Only in the highest temperature regime is there a direct proportionality between E_a and Δ (with a non-trivial small numeric prefactor) [3, 4]; at lower temperatures the observed activation energy is non-universal and disorder-dependent [1, 2].

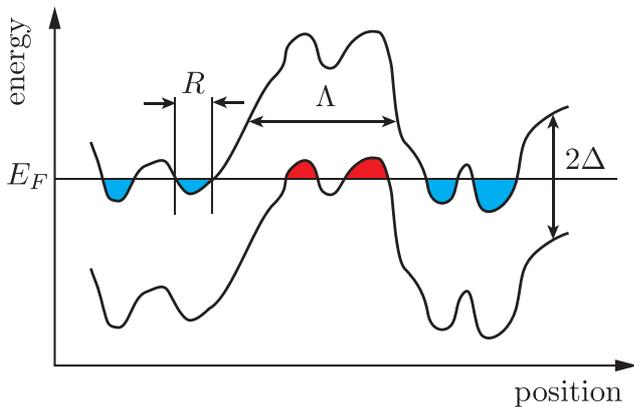


Fig. 1. Schematic energy diagram of a completely compensated semiconductor with relatively weak disorder. The wavy lines show the conduction band bottom and the valence band ceiling separated by the gap 2Δ . Droplets of holes are shaded by red, while electron droplets are shaded by blue. Here R is the size of a droplet, and Λ is the size of a droplet cloud (puddle), which contains several droplets

In this paper we consider a similar problem in two dimensions. Specifically, we consider a two-dimensional small band gap semiconductor resting on a thick substrate with a three-dimensional concentration of randomly-positioned impurities and focus on the case when $\Gamma \gg \Delta$ (see Fig. 2). We derive the temperature dependence of the electrical conductivity across all temperature regimes and show that the observed activation energy of the conductivity can be very small.

Understanding the relation between the energy gap and the observed activation energy for transport is of crucial importance for studying a variety of new 2D electron systems. For example, recent studies of 2D topological insulators (TIs) [5–7], films of 3D TIs [8–24], bilayer graphene (BLG) with an orthogonal electric field [25, 26] and twisted bilayer graphene (TBG) [27–31] use the transport activation energy as a way of characterizing small energy gaps. In all these cases the observed activation energy is much smaller

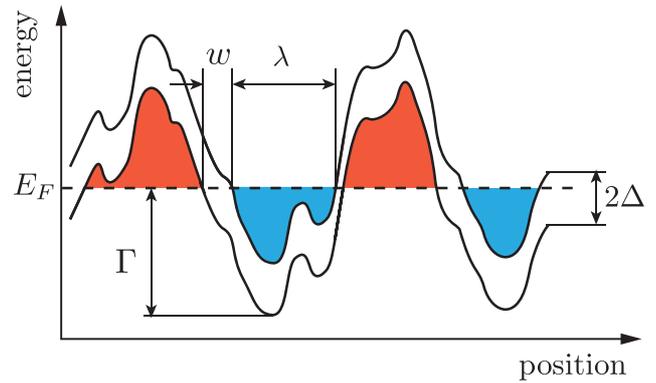


Fig. 2. Schematic picture of a cross section of puddles for the case of strong disorder, $\Gamma \gg \Delta$. The wavy lines show the conduction band bottom and the valence band ceiling separated by the gap 2Δ . The red shaded region above the Fermi level $E_F = 0$ represents a hole puddle, while the blue shaded region below E_F represents an electron puddle. Γ is the amplitude of the disorder potential, λ is the screening length, and w is the width of the barrier between neighboring puddles

than the energy gap that is expected theoretically or measured through local probes like optical absorption or scanning tunneling microscopy.

Here, we show that there is indeed no simple proportionality between the energy gap and the activation energy except at the highest temperature regime, which is likely irrelevant for many experimental contexts. Instead, we find a wide regime of temperature and disorder strength for which the activation energy is dramatically smaller than the energy gap. At the lowest temperatures the conductivity follows the Efros–Shklovskii (ES) law rather than an Arrhenius law, and this dependence can give the appearance of a small activation energy.

Let us dwell on two likely applications of our theory. First, our results may be especially relevant for ongoing efforts to understand the energy gaps arising in TBG at certain commensurate fillings of the moiré superlattice [27–31]. Such gaps apparently arise from electron–electron interactions, but the observed activation energies of the maximally insulating state are typically an order of magnitude smaller than the naive interaction scale (see, e.g., Refs. [28, 29]), and they vary significantly from one sample to another. Scanning tunneling microscopy studies also suggest a gap on the order of ten times larger than the observed activation energy [32, 33]. The theory we present here offers a natural way to interpret this discrepancy.

Second, our theory can be applied to the huge body of experimental work on thin films of 3D TI, where the surface electrons have a small gap 2Δ due to hybridiza-

tion of the surface states of two surfaces [8,9], or due to intentionally introduced magnetic impurities [10–24]. Understanding the origin of the small apparent activation energy $E_a \ll \Delta$ is crucial for achieving metrological precision of the quantum anomalous Hall effect [11,13,16,19–24,34–36] and the quantum spin Hall effect [9,37–39].

The model we consider is a two-dimensional semiconductor with band gap 2Δ atop a substrate with a three-dimensional concentration N of random sign charged impurities. We assume that the semiconductor has a gapped Dirac dispersion law

$$\epsilon^2(\mathbf{k}) = (\hbar v k)^2 + \Delta^2. \quad (1)$$

We are mostly interested in the case when the amplitude Γ of spatial fluctuations of the random potential satisfies $\Gamma \gg \Delta$, so that electron and hole puddles occupy almost half of the space each and are separated by a small insulating gap which occupies only a small fraction of the space (see Fig. 2). This system is an insulator because in 2D neither electron nor hole puddles percolate, and they are disconnected from each other. Throughout this paper we mostly focus on the case of zero chemical potential, for which electron and hole puddles are equally abundant and the system achieves its maximally insulating state. We argue that this situation is likely realized in the experiments of Refs. [5–33].

The remainder of this paper is organized as follows. In the following section we first summarize our main results for the temperature-dependent conductivity. Sections 3 and 4 concentrate on the case $\Gamma \gg \Delta$ illustrated by Fig. 2. In Sec. 3 we start from reviewing the fractal geometry of two-dimensional puddles and then calculate the action accumulated by electrons tunneling across the gap between two neighboring fractal metallic puddles, the corresponding localization length, and the critical value of the ratio Γ/Δ , at which crossover to weak localization takes place. In Sec. 4 we calculate the hopping conductivity for the case $\Gamma \gg \Delta$.

In Sec. 5 we study the illustrated by Fig. 1 case where the impurity concentration N is lower and present the parameters of NNH and VRH as functions of N . Section 6 studies what happens when the Fermi level moves away from the neutrality point. We arrive at the “phase diagram” of the re-entrant metal–insulator–metal (MIM) transition. Section 7 deals with the generalization of our results to thin TI films. Because of large interest to such films [8–10,12–24,34–49], in this section we add a fair amount of numerical estimates. In Sec. 8 we briefly return to the problem of three-dimensional, completely-compensated semiconductors with a

gapped Dirac dispersion, and extend the previous theory [1–3] to the case when disorder potential fluctuations exceed Δ . We again arrive at a re-entrant MIM transition away from the neutrality point. We close in Sec. 9 with a summary and conclusion. Some results of this paper are published in its shorter version [50].

The results from the list of Refs. [1–85] are used or/and discussed in our work. The figures illustrating our results are presented below.

2. SUMMARY AND CONCLUSION

In this paper we have considered the temperature-dependent conductivity of a two-dimensional insulator subjected to disorder by Coulomb impurities in the substrate. Our primary results can be summarized as follows. When the impurity concentration N is below a certain value N_0 (see Eq. (6)), the random potential of charged impurities necessarily produces large band bending, which the amplitude Γ becomes much larger than Δ . Then the system can be described as a network of large and closely-spaced fractal puddles (Fig. 2) separated by narrow insulating barriers (Fig. 5). This disorder landscape implies low-energy pathways for electron conduction, leads to the “three-mechanism sequence” illustrated in Fig. 3. The high temperature regime with $E_a = \Delta$ is relegated to only such high temperatures that T is comparable to Δ . The second regime, the nearest neighbor hopping between puddles (NNH), exhibits a parametrically smaller activation energy, whose value depends on the impurity concentration. At the lowest temperatures the conductivity is due to the Efros–Shklovskii variable range hopping (VRH), which may appear as an even smaller activation energy when measured over a limited temperature range. Experiments are instead more likely to observe NNH or ES VRH, with an activation energy that declines very rapidly with increasing N (Fig. 4).

When the impurity concentration N exceeds another critical value N_c the tunnel barriers between puddles become thin enough to be nearly transparent, and electrons are delocalized across many puddles. In this limit the conductivity follows ES law with the localization length growing exponentially with increased disorder. The corresponding apparent activation energy falls exponentially, so that in mesoscopic samples one effectively has an unconventional disorder-induced insulator-to-metal transition (IMT). The analogous problem for three-dimensional insulators (see Sec. 8) shows

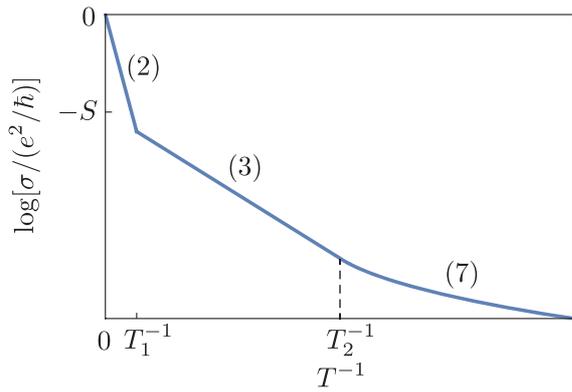


Fig. 3. Logarithm of the dimensionless conductivity $\sigma/(e^2/\hbar)$ as a function of the inverse temperature T^{-1} in the case $1 \ll \Gamma/\Delta \ll (\Gamma/\Delta)_c$. At high temperature $T > T_1$, the conductivity has activation energy Δ . At intermediate temperature $T_2 < T < T_1$, the conductivity is dominated by NNH. At low temperatures $T < T_2$, NNH is replaced by ES VRH. Numbers adjacent to different parts of the line show corresponding equations. Temperatures T_1 and T_2 are given by Eqs. (9) and (10)

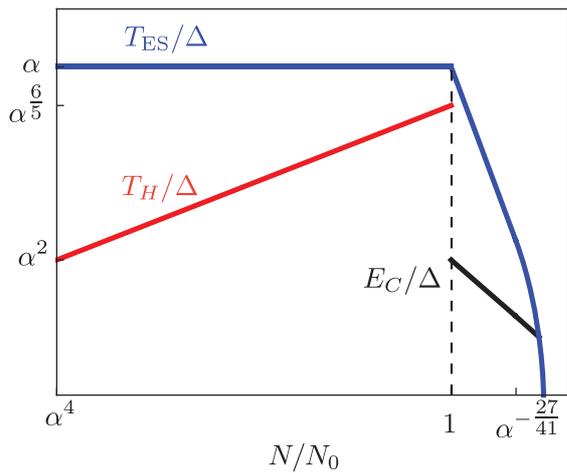


Fig. 4. Schematic log-log plots of characteristic energies of three kinds of hopping conductivity. The characteristic temperature of ES law T_{ES} (blue line), the activation energy of NNH, E_C (black solid line) and the characteristic temperature of hybrid conductivity T_H (red line) are shown as functions of the dimensionless impurity concentration $N/N_0 = (\Gamma/\Delta)^3$. The left part of the plot where $N/N_0 < 1$ corresponds to Eqs. (41) and (12), while the right part at $N/N_0 > 1$ corresponds to Eqs. (8) and (4). In the horizontal axis $N/N_0 = N_c/N_0 = \alpha^{-27/41}$ corresponds to $\Gamma/\Delta = (\Gamma/\Delta)_c$ given by Eq. (28). At this point $T_{ES} = \alpha^{87/41} \Delta$. When $\Gamma/\Delta > (\Gamma/\Delta)_c$ the localization length ξ increases exponentially and T_{ES} decreases exponentially

a genuine IMT due to percolation of electron and hole puddles separately.

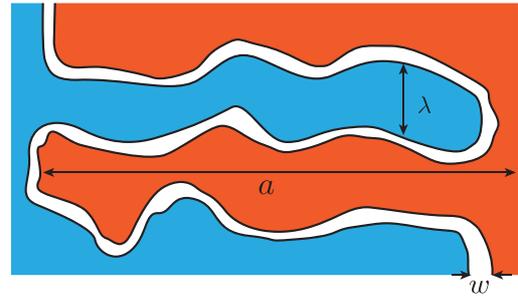


Fig. 5. Schematic picture of interlocked “fingers” of neighboring puddles. Here the length of “fingers” a is of order of the puddle diameter. One can imagine that Fig. 2 shows a vertical cross section of Fig. 5

Above we were talking about the neutrality point. When the Fermi level is away from neutrality point and the concentration of impurities is relatively small, there is a conventional metal–insulator transition with increasing disorder. Combining it with IMT at large impurity concentrations away from neutrality we arrive at a disorder driven re-entrant MIM transition. (See phase diagrams of such transitions shown in Fig. 7 and Fig. 9.)

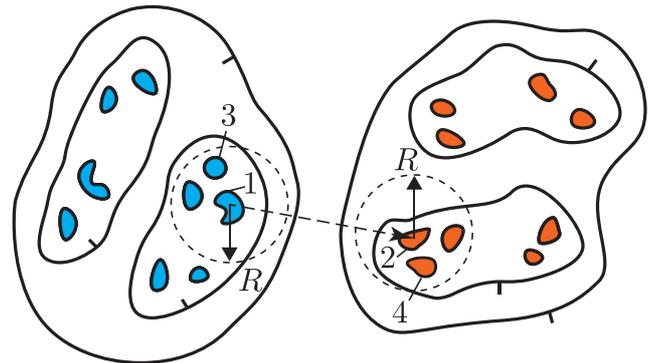


Fig. 6. Schematic map of nearest neighbor electron and hole puddles containing many electron (blue) and hole (red) puddles. The continuous lines are equipotential contours of the electron energy. As in geographical maps the direction of descent is indicated by a short stroke. The smallest contours represent boundaries of droplets at the chemical potential. The dashed arrow shows the shortest hop between the two puddles. At $T \ll T_1'$ electron searches in dashed circles of radius R for droplets 3 and 4 with closer to the chemical potential energies, which provide a smaller inter-puddle hop resistance

Our results have implications for a wide variety of experiments on 2D electron systems with a narrow energy gap. Some of these include 2D and thin 3D TIs, Bernal bilayer graphene with a perpendicular displacement field, and twisted bilayer graphene, as mentioned in the Introduction. In such systems the

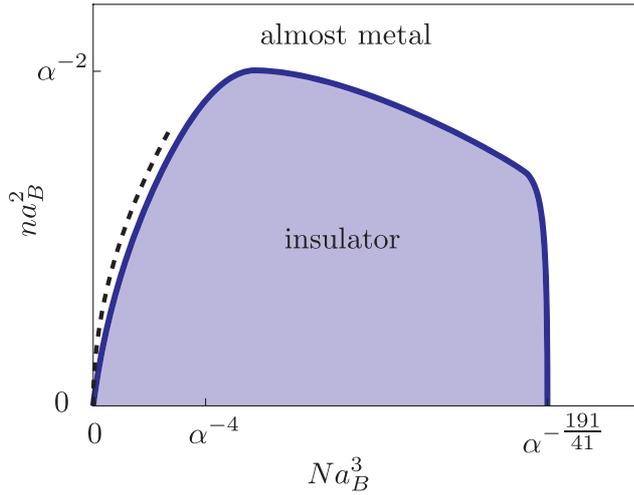


Fig. 7. Schematic n - N phase diagram in a two-dimensional semiconductor. The shaded blue domain is the insulator phase while the white domain is the almost metal phase. On the left (small N) side of the diagram the phase boundary follows Eq. (43) (dashed line) and reaches the maximum near $N a_B^3 = N_0 a_B^3 = \alpha^{-4}$. On the right side the maximum of the phase boundary is determined by criterion $G(n, N) = 1$ for tunneling between electron puddles. When with decreasing n this tunneling rate yields to the tunneling between electron and hole puddles, the boundary becomes vertical, i. e., sticks to the critical point $N a_B^3 = N_c a_B^3 = \alpha^{-191/41}$ all the way till $n = 0$ (cf. Eq. (28)). We use $\alpha = 0.12$ for this plot

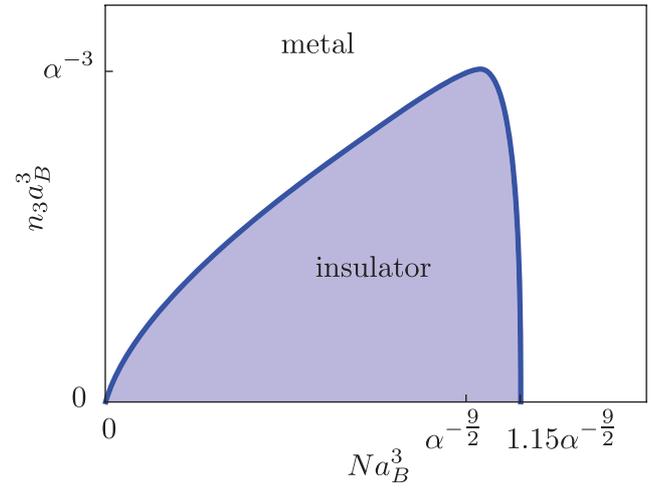


Fig. 9. Schematic n_3 - N plane phase diagram of a 3D narrow gap strongly compensated semiconductor. The shaded blue domain is the insulator phase while the white domain is the metal phase. The phase boundary follows Eq. (65) on the left side, reaches the maximum $n_3 a_B^3 = \alpha^{-3}$ near $N a_B^3 = N_1 a_B^3 = \alpha^{-9/2}$, and then vertically drops at $N = N_c = 1.15 N_1$

an essentially unavoidable limitation, since the apparent activation energy E_a at low temperature has no simple relation to the energy gap, and in general E_a can be taken only as a weak lower bound. No wonder that the transport activation energy in many cases is 10–100 times smaller than the value expected theoretically or measured by probes like optical absorption or tunneling spectroscopy. In this paper we studied in details gapped thin films of 3D topological insulators, which due to the large dielectric constant have peculiar 3D-like electrostatics (see Sec. 7).

The existence of an apparent disorder-induced IMT in strongly compensated semiconductor is an especially striking result of our analysis. For conventional insulators, this apparent transition cannot be called a true IMT, since in 2D the zero-temperature conductance flows toward zero in the thermodynamic limit for any finite amount of disorder [83]. However, the situation may be different for thin TI films, since the spin-orbit coupling of the TI surface states permits a stable metallic phase [84,85]. A full theory of this IMT in TI films is beyond the scope of our current analysis.

Finally, we mention that the tunneling between puddles can be reduced by applying a magnetic field orthogonal to the 2D plane. This reduction leads to an exponential positive magnetoresistance in the insulating phase, similar to the one studied in Ref. [2]. The theory of such magnetoresistance is also beyond the scope of this paper.

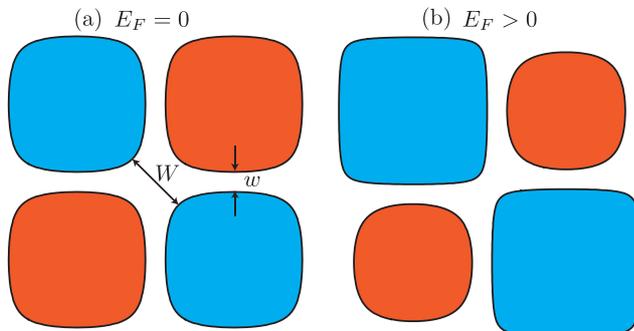


Fig. 8. Illustration of the competition of the two tunneling rates for a chessboard potential. Blue and red domains are the electron and hole puddles separated by insulating gap (white). a) At the neutrality point, $n = 0$, $E_F = 0$, the shortest tunneling distance between electron puddles W is much larger than the distance w between electron and hole puddles. b) At $E_F > 0$ and growing n , W decreases. Eventually it becomes smaller than w and vanishes at the percolation transition where all electron puddles merge into the infinite cluster

temperature-dependent conductivity is often used as a primary way to diagnose the magnitude of energy gaps. Our results here suggest that such studies suffer

Acknowledgments. We are grateful to David Goldhaber-Gordon, Ilya Gruzberg, Shahal Ilani, Fai Mak, Koji Muraki, Stevan Nadj-Perge, and Christoph Stampfer for helpful discussions.

Funding. Y.H. is supported by the William I. Fine Theoretical Physics Institute. B.S. was partly supported by NSF grant DMR-2045742.

The full text of this paper is published in the English version of JETP.

REFERENCES

1. B. I. Shklovskii and A. L. Efros, Zh. Eksp. Theor. Fiz. **62**, 1156 (1972) [Sov. Phys. JETP **35**, 610 (1972)].
2. B. I. Shklovskii and A. L. Efros, *Electronic Properties of Doped Semiconductors*, Vol. 45, Springer, Berlin (1984).
3. B. Skinner, T. Chen, and B. I. Shklovskii, Phys. Rev. Lett. **109**, 176801 (2012).
4. T. Chen and B. Skinner, Phys. Rev. B **94**, 085146 (2016).
5. E. B. Olshanetsky, Z. D. Kvon, G. M. Gusev, A. D. Levin, O. E. Raichev, N. N. Mikhailov, and S. A. Dvoretzky, Phys. Rev. Lett. **114**, 126802 (2015).
6. Z. D. Kvon, D. A. Kozlov, E. B. Olshanetsky, G. M. Gusev, N. N. Mikhailov, and S. A. Dvoretzky, Phys. Usp. **63**, 629 (2020).
7. L. Pan, X. Liu, Q. L. He, A. Stern, G. Yin, X. Che, Q. Shao, P. Zhang, P. Deng, C.-Y. Yang, B. Casas, E. S. Choi, J. Xia, X. Kou, and K. L. Wang, Sci. Adv. **6**, eaaz3595 (2020).
8. D. Nandi, B. Skinner, G. H. Lee, K.-F. Huang, K. Shain, C.-Z. Chang, Y. Ou, S.-P. Lee, J. Ward, J. S. Moodera, P. Kim, B. I. Halperin, and A. Yacoby, Phys. Rev. B **98**, 214203 (2018).
9. S. K. Chong, L. Liu, K. Watanabe, T. Taniguchi, T. Sparks, F. Liu, and V. V. Deshpande, Nature Portfolio (2021), 10.21203/rs.3.rs-519444/v1.
10. J. G. Checkelsky, J. Ye, Y. Onose, Y. Iwasa, and Y. Tokura, Nature Phys. **8**, 729 (2012).
11. C.-Z. Chang, J. Zhang, X. Feng, J. Shen, Z. Zhang, M. Guo, K. Li, Y. Ou, P. Wei, L.-L. Wang, Z.-Q. Ji, Y. Feng, S. Ji, X. Chen, J. Jia, X. Dai, Z. Fang, S.-C. Zhang, K. He, Y. Wang, L. Lu, X.-C. Ma, and Q.-K. Xue, Science **340**, 167 (2013).
12. K. He, X.-C. Ma, X. Chen, L. Lu, Y.-Y. Wang, and Q.-K. Xue, Chinese Phys. B **22**, 067305 (2013).
13. M. Mogi, R. Yoshimi, A. Tsukazaki, K. Yasuda, Y. Kozuka, K. S. Takahashi, M. Kawasaki, and Y. Tokura, Appl. Phys. Lett. **107**, 182401 (2015).
14. L. Zhang, D. Zhao, Y. Zang, Y. Yuan, G. Jiang, M. Liao, D. Zhang, K. He, X. Ma, and Q. Xue, APL Materials **5**, 076106 (2017).
15. W. Wang, Y. Ou, C. Liu, Y. Wang, K. He, Q.-K. Xue, and W. Wu, Nature Phys. **14**, 791 (2018).
16. E. J. Fox, I. T. Rosen, Y. Yang, G. R. Jones, R. E. Elmquist, X. Kou, L. Pan, K. L. Wang, and D. Goldhaber-Gordon, Phys. Rev. B **98**, 075145 (2018).
17. J. Moon, J. Kim, N. Koirala, M. Salehi, D. Vanderbilt, and S. Oh, Nano Lett. **19**, 3409 (2019), PMID: 31038971.
18. I. T. Rosen, I. Yudhistira, G. Sharma, M. Salehi, M. A. Kastner, S. Oh, S. Adam, and D. Goldhaber-Gordon, Phys. Rev. B **99**, 201101 (2019).
19. Y. Okazaki, T. Oe, M. Kawamura, R. Yoshimi, S. Nakamura, S. Takada, M. Mogi, K. S. Takahashi, A. Tsukazaki, M. Kawasaki, Y. Tokura, and N.-H. Kaneko, Appl. Phys. Lett. **116**, 143101 (2020).
20. L. K. Rodenbach, I. T. Rosen, E. J. Fox, P. Zhang, L. Pan, K. L. Wang, M. A. Kastner, and D. Goldhaber-Gordon, APL Materials **9**, 081116 (2021).
21. K. M. Fijalkowski, N. Liu, P. Mandal, S. Schreyeck, K. Brunner, C. Gould, and L. W. Molenkamp, Nature Commun. **12**, 1 (2021).
22. G. M. Ferguson, R. Xiao, A. R. Richardella, D. Low, N. Samarth, and K. C. Nowack, arXiv:2112.13122 [cond-mat.mes-hall].
23. I. T. Rosen, M. P. Andersen, L. K. Rodenbach, L. Tai, P. Zhang, K. L. Wang, M. A. Kastner, and D. Goldhaber-Gordon, arXiv:2112.13123 [cond-mat.mes-hall].
24. Y. Okazaki, T. Oe, M. Kawamura, R. Yoshimi, S. Nakamura, S. Takada, M. Mogi, K. S. Takahashi, A. Tsukazaki, M. Kawasaki, Y. Tokura, and N.-H. Kaneko, Nature Phys. **18**, 25 (2022).
25. K. Zou and J. Zhu, Phys. Rev. B **82**, 081407 (2010).
26. T. Taychatanapat and P. Jarillo-Herrero, Phys. Rev. Lett. **105**, 166601 (2010).
27. M. Serlin, C. L. Tschirhart, H. Polshyn, Y. Zhang, J. Zhu, K. Watanabe, T. Taniguchi, L. Balents, and A. F. Young, Science **367**, 900 (2020).

28. P. Stepanov, I. Das, X. Lu, A. Fahimniya, K. Watanabe, T. Taniguchi, F. H. L. Koppens, J. Lischner, L. Levitov, and D. K. Efetov, *Nature* **583**, 375 (2020).
29. J. M. Park, Y. Cao, K. Watanabe, T. Taniguchi, and P. Jarillo-Herrero, *Nature* **592**, 43 (2021).
30. Y. Cao, V. Fatemi, A. Demir, S. Fang, S. L. Tomarken, J. Y. Luo, J. D. Sanchez-Yamagishi, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Kaxiras, R. C. Ashoori, and P. Jarillo-Herrero, *Nature* **556**, 80 (2018).
31. Y. Cao, V. Fatemi, S. Fang, K. Watanabe, T. Taniguchi, E. Kaxiras, and P. Jarillo-Herrero, *Nature* **556**, 43 (2018).
32. Y. Xie, B. Lian, B. Jäck, X. Liu, C.-L. Chiu, K. Watanabe, T. Taniguchi, B. A. Bernevig, and A. Yazdani, *Nature* **572**, 101 (2019).
33. Y. Choi, H. Kim, C. Lewandowski, Y. Peng, A. Thomson, R. Polski, Y. Zhang, K. Watanabe, T. Taniguchi, J. Alicea, and S. Nadj-Perge, *Nature Phys.* **17**, 1375 (2021).
34. R. Yu, W. Zhang, H.-J. Zhang, S.-C. Zhang, X. Dai, and Z. Fang, *Science* **329**, 61 (2010).
35. J. Zhang, C.-Z. Chang, P. Tang, Z. Zhang, X. Feng, K. Li, L. li Wang, X. Chen, C. Liu, W. Duan, K. He, Q.-K. Xue, X. Ma, and Y. Wang, *Science* **339**, 1582 (2013).
36. C.-Z. Chang, C.-X. Liu, and A. H. MacDonald, arXiv:2202.13902 [cond-mat.mes-hall].
37. C.-X. Liu, H. Zhang, B. Yan, X.-L. Qi, T. Frauenheim, X. Dai, Z. Fang, and S.-C. Zhang, *Phys. Rev. B* **81**, 041307(R) (2010).
38. H.-Z. Lu, W.-Y. Shan, W. Yao, Q. Niu, and S.-Q. Shen, *Phys. Rev. B* **81**, 115407 (2010).
39. J. Linder, T. Yokoyama, and A. Sudbø, *Phys. Rev. B* **80**, 205401 (2009).
40. Y. Zhang, K. He, C.-Z. Chang, C.-L. Song, L.-L. Wang, X. Chen, J.-F. Jia, Z. Fang, X. Dai, W.-Y. Shan, S.-Q. Shen, Q. Niu, X.-L. Qi, S.-C. Zhang, X.-C. Ma, and Q.-K. Xue, *Nature Phys.* **6**, 584 (2010).
41. Y. Sakamoto, T. Hirahara, H. Miyazaki, S.-i. Kimura, and S. Hasegawa, *Phys. Rev. B* **81**, 165432 (2010).
42. T. Zhang, J. Ha, N. Levy, Y. Kuk, and J. Stroscio, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 056803 (2013).
43. D. Kim, P. Syers, N. P. Butch, J. Paglione, and M. S. Fuhrer, *Nature Commun.* **4**, 2040 (2013).
44. Y. L. Chen, J.-H. Chu, J. G. Analytis, Z. K. Liu, K. Igarashi, H.-H. Kuo, X. L. Qi, S. K. Mo, R. G. Moore, D. H. Lu, M. Hashimoto, T. Sasagawa, S. C. Zhang, I. R. Fisher, Z. Hussain, and Z. X. Shen, *Science* **329**, 659 (2010).
45. S.-Y. Xu, M. Neupane, C. Liu, D. Zhang, A. Richardella, L. Andrew Wray, N. Alidoust, M. Leandersson, T. Balasubramanian, J. Sánchez-Barriga, O. Rader, G. Landolt, B. Slomski, J. Hugo Dil, J. Osterwalder, T.-R. Chang, H.-T. Jeng, H. Lin, A. Bansil, N. Samarth, and M. Zahid Hasan, *Nature Phys.* **8**, 616 (2012).
46. M. Ye, W. Li, S. Zhu, Y. Takeda, Y. Saitoh, J. Wang, H. Pan, M. Nurmamat, K. Sumida, F. Ji, Z. Liu, H. Yang, Z. Liu, D. Shen, A. Kimura, S. Qiao, and X. Xie, *Nature Commun.* **6**, 8913 (2015).
47. Y. Tokura, K. Yasuda, and A. Tsukazaki, *Nature Rev. Phys.* **1**, 126 (2019).
48. Y. Deng, Y. Yu, M. Z. Shi, Z. Guo, Z. Xu, J. Wang, X. H. Chen, and Y. Zhang, *Science* **367**, 895 (2020).
49. R. Lu, H. Sun, S. Kumar, Y. Wang, M. Gu, M. Zeng, Y.-J. Hao, J. Li, J. Shao, X.-M. Ma, Z. Hao, K. Zhang, W. Mansuer, J. Mei, Y. Zhao, C. Liu, K. Deng, W. Huang, B. Shen, K. Shimada, E. F. Schwier, C. Liu, Q. Liu, and C. Chen, *Phys. Rev. X* **11**, 011039 (2021).
50. Y. Huang, Y. He, B. Skinner, and B. I. Shklovskii, *Phys. Rev. B* **105**, 054206 (2022).
51. T. Chen, B. Skinner, and B. I. Shklovskii, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 126805 (2012).
52. J. Zhang and B. I. Shklovskii, *Phys. Rev. B* **70**, 115317 (2004).
53. E. McCann and M. Koshino, *Rep. Prog. Phys.* **76**, 056503 (2013).
54. S. Slizovskiy, A. Garcia-Ruiz, A. I. Berdyugin, N. Xin, T. Taniguchi, K. Watanabe, A. K. Geim, N. D. Drummond, and V. I. Fal'ko, *Nano Lett.* **21**, 6678 (2021), PMID: 34296602.
55. M. B. Isichenko, *Rev. Mod. Phys.* **64**, 961 (1992).
56. B. Skinner and B. I. Shklovskii, *Phys. Rev. B* **87**, 075454 (2013).
57. B. I. Shklovskii and A. L. Efros, *Zh. Eksp. Theor. Fiz.* **59**, 1343 (1970) [*Sov. Phys. JETP* **32**, 733 (1971)].
58. M. E. Raikh and I. M. Ruzin, *Sov. Phys. Semicond.* **19**, 745 (1985).

59. H. Samavati, A. Hajimiri, A. Shahani, G. Nasserbakht, and T. Lee, *IEEE J. Solid-State Circuits* **33**, 2035 (1998).
60. A. L. Efros and B. I. Shklovskii, *J. Phys. C: Sol. St. Phys.* **8**, L49 (1975).
61. B. I. Shklovskii, *Low Temp. Phys.* **43**, 699 (2017) [*Fizika Nizkikh Temperatur* **43**, 879 (2017)].
62. B. I. Shklovskii, *Fizika i Tekhnika Poluprovodnikov* **7**, 112 (1973) [*Sov. Phys. Semicond.* **7**, 77 (1973)].
63. Y. Huang, Y. Ayino, and B. I. Shklovskii, *Phys. Rev. Mater.* **5**, 044606 (2021).
64. T. Li, S. Jiang, L. Li, Y. Zhang, K. Kang, J. Zhu, K. Watanabe, T. Taniguchi, D. Chowdhury, L. Fu, J. Shan, and K. F. Mak, *Nature* **597**, 350 (2021).
65. A. Ghiotto, E.-M. Shih, G. S. S. G. Pereira, D. A. Rhodes, B. Kim, J. Zang, A. J. Millis, K. Watanabe, T. Taniguchi, J. C. Hone, L. Wang, C. R. Dean, and A. N. Pasupathy, *Nature* **597**, 345 (2021).
66. W. Richter and C. R. Becker, *Phys. Stat. Sol. (b)* **84**, 619 (1977).
67. N. Borgwardt, J. Lux, I. Vergara, Z. Wang, A. A. Taskin, K. Segawa, P. H. M. van Loosdrecht, Y. Ando, A. Rosch, and M. Grüninger, *Phys. Rev. B* **93**, 245149 (2016).
68. T. Bömerich, J. Lux, Q. T. Feng, and A. Rosch, *Phys. Rev. B* **96**, 075204 (2017).
69. J. Zhang, C.-Z. Chang, Z. Zhang, J. Wen, X. Feng, K. Li, M. Liu, K. He, L. Wang, X. Chen, Q.-K. Xue, X. Ma, and Y. Wang, *Nature Commun.* **2**, 574 (2011).
70. N. S. Rytova, *Moscow Univ. Phys. Bull.* **3**, 18 (1967).
71. A. Chaplik and M. Entin, *JETP* **34**, 1335 (1971) [*Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **61**, 2496 (1971)].
72. L. V. Keldysh, *JETP Lett.* **29**, 658 (1979) [*Pis'ma v Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **29**, 716 (1979)].
73. Y. Huang and B. I. Shklovskii, *Phys. Rev. B* **103**, 165409 (2021).
74. Y. Huang and B. I. Shklovskii, *Phys. Rev. B* **104**, 054205 (2021).
75. H. Weng, X. Dai, and Z. Fang, *Phys. Rev. X* **4**, 011002 (2014).
76. M. K. Tran, J. Levallois, P. Lerch, J. Teyssier, A. B. Kuzmenko, G. Autès, O. V. Yazyev, A. Ubal dini, E. Giannini, D. van der Marel, and A. Akrap, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 047402 (2014).
77. A. Ohmura, Y. Higuchi, T. Ochiai, M. Kanou, F. Ishikawa, S. Nakano, A. Nakayama, Y. Yamada, and T. Sasagawa, *Phys. Rev. B* **95**, 125203 (2017).
78. S. Singh, A. C. Garcia-Castro, I. Valencia-Jaime, F. Munoz, and A. H. Romero, *Phys. Rev. B* **94**, 161116 (2016).
79. D. Vu, W. Zhang, C. Şahin, M. E. Flatté, N. Trivedi, and J. P. Heremans, *Nature Mater.* **20**, 1525 (2021).
80. B. Skinner, *Phys. Rev. B* **90**, 060202 (2014).
81. D. G. Polyakov and B. I. Shklovskii, *Phys. Rev. B* **48**, 11167 (1993).
82. B. I. Shklovskii and A. L. Efros, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **60**, 867 (1971) [*Sov. Phys. JETP* **33**, 468 (1971)].
83. E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, and T. V. Ramakrishnan, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 673 (1979).
84. S. Hikami, A. I. Larkin, and Y. Nagaoka, *Progr. Theor. Phys.* **63**, 707 (1980).
85. R. S. K. Mong, J. H. Bardarson, and J. E. Moore, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 076804 (2012).

WEAK LOCALIZATION IN p -TYPE HETEROSTRUCTURES IN THE PRESENCE OF PARALLEL MAGNETIC FIELD

*M. O. Nestoklon, L. E. Golub**

Ioffe Institute, 194021, St. Petersburg, Russia

Received June 01, 2022,
revised version June 01, 2022
Accepted June 02, 2022

Theory of weak localization is developed for two-dimensional holes in the presence of in-plane magnetic field. The Zeeman splitting even in the hole momentum results in the spin-dependent phase changing the quantum interference. The negative correction to the conductivity is shown to decrease by a factor of two by the in-plane magnetic field. The positive magnetoconductivity in a classically weak perpendicular field caused by the weak localization is calculated for both quadratic and quartic in momentum Zeeman hole splittings. Calculations show that the conductivity corrections are very close to each other in these two cases of low and high hole density.

Contribution for the JETP special issue in honor of E. I. Rashba's 95th birthday

DOI: 10.31857/S0044451022100030

EDN: EMYFKL

Spin-dependent phenomena attract a great attention due to spin-orbit interaction allowing spin manipulation by electrical or optical means. The first important move in this way was a discovery of the Rashba splitting of electron energy spectrum in bulk wurtzite-type semiconductors [1]. In two-dimensional (2D) systems, this splitting is present in heterostructures made of any material provided the structure inversion asymmetry is present [2]. Generally, the spin-orbit interaction is described by the term in the Hamiltonian which can be presented in the form

$$\mathcal{H}_{SO} = \hbar\boldsymbol{\sigma}\boldsymbol{\Omega}, \quad (1)$$

where $\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y)$ is a vector of Pauli matrices, and the spin-orbit splitting equals $2\hbar\Omega$.

The spin-orbit splitting of the electron energy spectrum leads to many interesting optical and transport phenomena [3]. In transport, it leads to a remarkable beating patterns in the Shubnikov–de Haas oscillations, where it can be easily detected. However, a good mobility is needed for such kind of manifestation of the Rashba splitting, which should be much larger than the level broadening. Nevertheless, even

in low-mobility samples the Rashba splitting can be measured. This can be done in classically low magnetic fields, where the magnetoresistance is caused by the weak localization (WL) effect, see Ref. [4] for review. Developed theoretical expressions for the WL correction to the conductivity valid for arbitrary values of the Rashba splitting allow adequately extracting the splitting value and other electron kinetic and band parameters by fitting the experimental data.

2D holes in semiconductor heterostructures represent a system which is very different from electrons. This happens because the holes in the ground 2D subband have spin projection $\pm 3/2$ on the structure main axis. In particular, they have a cubic in momentum Rashba splitting [5]. Due to the same reason, the Zeeman splitting of heavy-holes in the in-plane magnetic field at the bottom of the 2D subband is cubic in the field strength in the axial approximation. A small contribution for free holes is present due to cubic symmetry of the zinc-blende lattice forming the heterostructure [6] which, however, increases strongly for localized holes in quantum dots [7]. At finite wavevectors the situation changes, and the momentum-dependent in-plane Zeeman splitting arises. In the axial approximation, the Hamiltonian of heavy holes in the ground subband of a symmetrical quantum well in the presence

* E-mail: golub@coherent.ioffe.ru

of an in-plane magnetic field \mathbf{B}_{\parallel} is given by [8]

$$\mathcal{H}_{SO} = \hbar\sigma_{-}(\Delta_1 B_{+} k_{+}^2 + \Delta_2 B_{-} k_{-}^4) + \text{H. c.} \quad (2)$$

Here, \mathbf{k} is the in-plane wavevector, $\sigma_{\pm} = (\sigma_x \pm i\sigma_y)/2$ with the operators $\sigma_{x,y}$ coupling two Kramers-degenerate hole states,

$$B_{\pm} = B_x \pm iB_y, \quad k_{\pm} = k_x \pm ik_y,$$

and $\Delta_{1,2}$ are constants. This expression coincides with Eq. (1) where $\mathbf{\Omega}$ is given by

$$\Omega_x + i\Omega_y = B_{\parallel}(\Delta_1 k^2 e^{2i\varphi} + \Delta_2 k^4 e^{4i\varphi}) \quad (3)$$

with φ being an angle between \mathbf{k} and \mathbf{B}_{\parallel} .

According to estimates given in Ref. [9], the Zeeman splitting at $B_{\parallel} = 1$ T is $2\hbar\Omega \sim 0.1 \dots 1$ meV. This allows us to solve the WL problem by the method used in Refs. [4,10] assuming the ratio of the splitting and level broadening to be arbitrary but ignoring the difference in the Fermi wavevectors in spin subbands.

We study two limits of low and high hole densities where $\Delta_1 k_F^2$ prevails over $\Delta_2 k_F^4$ or vice versa. Here k_F is the Fermi wavevector. In both cases, the Zeeman splitting is isotropic in the \mathbf{k} -space, and the WL problem can be solved analytically. The hole Hamiltonian (2) is even in \mathbf{k} , and therefore the WL correction to conductivity and the anomalous magnetoresistance are negative. We consider diffusive and ballistic regimes of WL [11], where the interference contribution to the conductivity occurs on large and small trajectories, respectively.

In the low-density limit, the Hamiltonian (1) with $\mathbf{\Omega}$ from Eq. (3) has the same form as that of exciton-polaritons in microcavities with $\Omega = \Delta_1 k_F^2 B_{\parallel}$ instead of the longitudinal-transverse splitting, see Ref. [12]. Therefore the negative WL correction to conductivity in the diffusion approximation is given by the expression following from Ref. [12], see full paper [13] for details.

At high density the results for both zero-field correction and the magnetoconductivity are the same, the only difference is that $\Omega = \Delta_2 k_F^4 B_{\parallel}$. Differences in the functional forms of the WL contribution to the conductivity at low and high densities appear in stronger perpendicular fields $B_z \sim B_{tr}$. Here $B_{tr} = \hbar/(2|e|l^2)$ is the ‘‘transport’’ magnetic field with l being the mean free path. In this case the ballistic trajectories with a few, three or more, impurities contribute to the conductivity, therefore this is called ballistic regime of WL.

In the ballistic regime, we take into account non-logarithmic corrections to the conductivity as well as

the non-backscattering contribution [14,15]. For numerical calculations of the conductivity corrections, we extend the approach used in Ref. [16], see full paper for details. In Fig. 1, the conductivity correction is shown as a function of B_z for various values of a product of the spin-orbit splitting $\Omega \propto B_{\parallel} k^2$ and the momentum scattering time τ . The zero- B_z value at large $\Omega\tau$ is twice smaller than at $\Omega = 0$. At large $B_z \gg B_{tr}$ all curves tend to the same dependence because of absence of spin rotations at characteristic trajectories with the size $\sim l_B \ll l$. The conductivity at k^4 -splitting is very close to these dependencies. Therefore the results of Fig. 1 are valid for the k^4 -type of splitting as well.

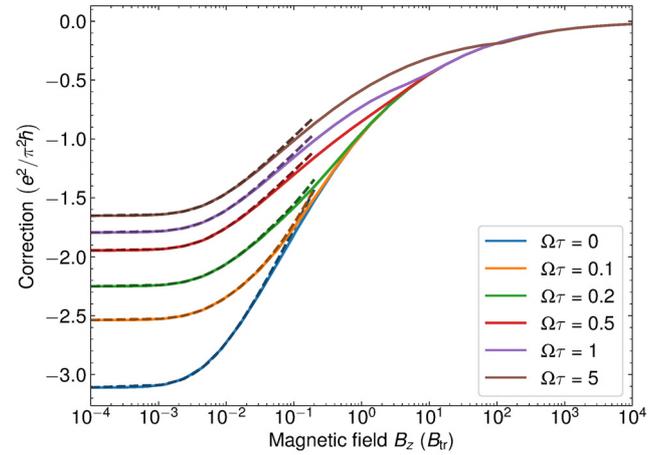


Fig. 1. Conductivity correction at k^2 -splitting as a function of B_z/B_{tr} for various $\Omega\tau \propto B_{\parallel}$. The dephasing time $\tau_{\phi}/\tau = 10^3$. Diffusion approximation results are shown by dashed lines

The WL correction to conductivity at $B_z = 0$ is analyzed in Fig. 2. We see that the size of the WL correction is a little bit larger in the case of k^2 -splitting. However, the difference is very small.

To summarize, the theory of WL of 2D holes in the presence of an in-plane magnetic field is developed. The momentum-dependent Zeeman splitting is taken into account which can be squared or quartic in k . The WL conductivity correction, which is negative, is derived for both cases. Calculations show that the results are very close to each other. The k -dependent Zeeman splitting suppresses the WL correction up to factor of two at large splitting. The positive magnetoconductivity in classically-weak perpendicular magnetic fields is calculated for arbitrary values of the Zeeman splitting. The developed theory is valid for arbitrary values of the product $\Omega\tau$, but with the spin splitting $2\hbar\Omega$ assumed much smaller than the Fermi energy. For higher spin

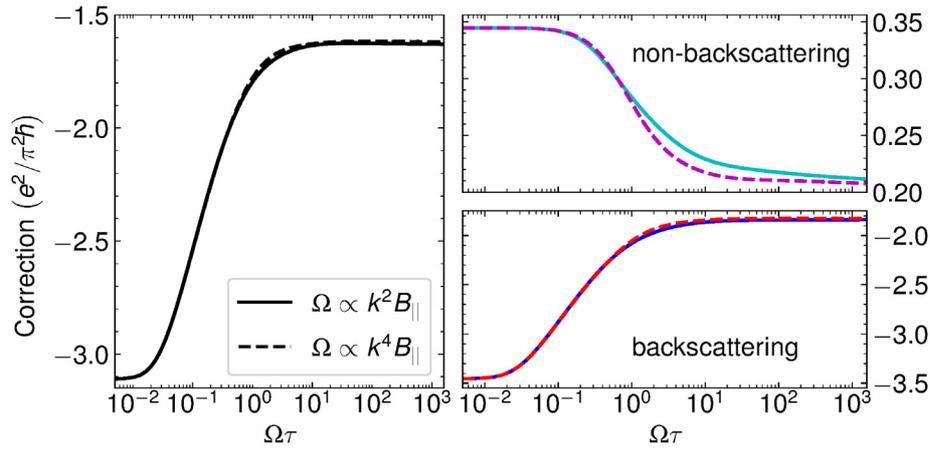


Fig. 2. Conductivity correction at $B_z = 0$ as a function of $\Omega\tau \propto B_{\parallel}$ at $\tau_{\phi}/\tau = 10^3$. The total conductivity correction, backscattering and non-backscattering contributions are shown in the left, upper right and lower right panels, respectively. Solid and dashed curves correspond to the k^2 - and k^4 -splittings

splittings, when they are comparable, one should take into account the difference of the Fermi wavevectors in two spin-split subbands, as it has been done for large Rashba splittings in Ref. [17].

Funding. We gratefully acknowledge the Foundation for the Advancement of Theoretical Physics and Mathematics “BASIS”. The numerical calculations of M.O.N. were supported by the Russian Science Foundation (Project 19-12-00051). The analytical expressions are derived by L. E. G. with support from the Russian Science Foundation (Project 22-12-00125).

The full text of this paper is published in the English version of JETP.

REFERENCES

1. E. I. Rashba, Fiz. Tverd. Tela **2**, 1224 (1960) [Sov. Phys. Solid State **2**, 1109 (1960)].
2. S. D. Ganichev and L. E. Golub, Phys. Status Solidi B **251**, 1801 (2014).
3. *Spin Physics in Semiconductors*, 2nd ed., edited by M. I. Dyakonov, Springer Series in Solid-State Sciences Vol. 157, Springer, Cham, Switzerland (2017).
4. M. M. Glazov and L. E. Golub, Semicond. Sci. Technol. **24**, 064007 (2009).
5. R. Winkler, *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*, Springer, Berlin (2003).
6. X. Marie, T. Amand, P. Le Jeune, M. Paillard, P. Renucci, L. E. Golub, V. D. Dymnikov, and E. L. Ivchenko, Phys. Rev. B **60**, 5811 (1999).
7. A. V. Trifonov, I. A. Akimov, L. E. Golub, E. L. Ivchenko, I. A. Yugova, A. N. Kosarev, S. E. Scholz, C. Sgroi, A. Ludwig, A. D. Wieck, D. R. Yakovlev, and M. Bayer, Phys. Rev. B **104**, L161405 (2021).
8. D. S. Miserev and O. P. Sushkov, Phys. Rev. B **95**, 085431 (2017).
9. E. Marcellina, P. Bhalla, A. R. Hamilton, and D. Culcer, Phys. Rev. B **101**, 121302(R) (2020).
10. F. V. Porubaev and L. E. Golub, Phys. Rev. B **90**, 085314 (2014).
11. A. P. Dmitriev, V. Yu. Kachorovskii, and I. V. Gornyi, Phys. Rev. B **56**, 9910 (1997).
12. M. M. Glazov and L. E. Golub, Phys. Rev. B **77**, 165341 (2008).
13. M. O. Nestoklon and L. E. Golub, arXiv:2206.00361 (2022).
14. L. E. Golub, Phys. Rev. B **71**, 235310 (2005).
15. M. O. Nestoklon, N. S. Averkiev, and S. A. Tarasenko, Solid State Commun. **151**, 1550 (2011).
16. M. O. Nestoklon and N. S. Averkiev, Phys. Rev. B **90**, 155412 (2014).
17. L. E. Golub, I. V. Gornyi, and V. Yu. Kachorovskii, Phys. Rev. B **93**, 245306 (2016).

SPIN AND VALLEY EFFECTS ON THE QUANTUM PHASE TRANSITION IN TWO DIMENSIONS

A. A. Shashkin^{a*}, *S. V. Kravchenko*^{b**}

^a *Institute of Solid State Physics, Russian Academy of Sciences
142432, Chernogolovka, Moscow District, Russia*

^b *Physics Department, Northeastern University
02115, Boston, Massachusetts, USA*

Received June 21, 2022,
revised version June 21, 2022
Accepted June 22, 2022

Contribution for the JETP special issue in honor of E. I. Rashba's 95th birthday

DOI: 10.31857/S0044451022100042

EDN: EMYXXZ

Abstract. Using several independent methods, we find that the metal–insulator transition occurs in the strongly-interacting two-valley two-dimensional electron system in ultra-high mobility SiGe/Si/SiGe quantum wells in zero magnetic field. The transition survives in this system in parallel magnetic fields strong enough to completely polarize the electrons' spins, thus making the electron system “spinless”. In both cases, the resistivity on the metallic side near the transition increases with decreasing temperature, reaches a maximum at a temperature T_{max} , and then decreases. The decrease reaches more than an order of magnitude in zero magnetic field. The value of T_{max} in zero magnetic field is found to be close to the renormalized Fermi temperature. However, rather than increasing along with the Fermi temperature, the value T_{max} decreases appreciably for spinless electrons in spin-polarizing magnetic fields. The observed behavior of T_{max} cannot be described by existing theories. The results indicate the spin-related origin of the effect. At the same time, the low-temperature resistivity drop in both spin-unpolarized and spinless electron systems is described quantitatively by the dynamical mean-field theory.

1. Introduction. Spin and valley degrees of freedom in two-dimensional (2D) electron systems have recently attracted much attention due to rapidly developing fields of spintronics and valleytronics (see,

e. g., Refs. [1–4]). The existence of the zero-magnetic-field metallic state and the metal–insulator transition (MIT) in strongly interacting 2D electron systems is intimately related to the existence of these degrees of freedom [5–8]. The MIT in two dimensions was theoretically envisioned based on the renormalization group analysis (see Ref. [5] for a review). It was first experimentally observed in a strongly-interacting 2D electron system in silicon metal–oxide–semiconductor field-effect transistors (MOSFETs) [9–12] and subsequently reported in a wide variety of 2D electron and hole systems: *p*-type SiGe heterostructures, *p*- and *n*-type GaAs/AlGaAs heterostructures, AlAs heterostructures, ZnO-related heterostructures etc. (for recent reviews, see Refs. [13, 14]). Now it is widely accepted that the driving force behind the MIT is the strong correlations between carriers. Here we study the metal–insulator transition and non-monotonic temperature-dependent resistivity on the metallic side near the MIT in the strongly-interacting two-valley 2D electron system in ultra-high mobility SiGe/Si/SiGe quantum wells in zero and spin-polarizing magnetic fields.

Measurements reported here were performed on ultra-high mobility SiGe/Si/SiGe quantum wells similar to those described in Refs. [15, 16]. The peak electron mobility, μ , in these samples reaches 240 m²/V·s. It is important to note that judging by the appreciably higher quantum electron mobility (~ 10 m²/V·s) in the SiGe/Si/SiGe quantum wells compared to that in Si MOSFETs, the residual disorder related to both short- and long-range random potential is drastically smaller

* E-mail: shashkin@issp.ac.ru

** E-mail: s.kravchenko@northeastern.edu

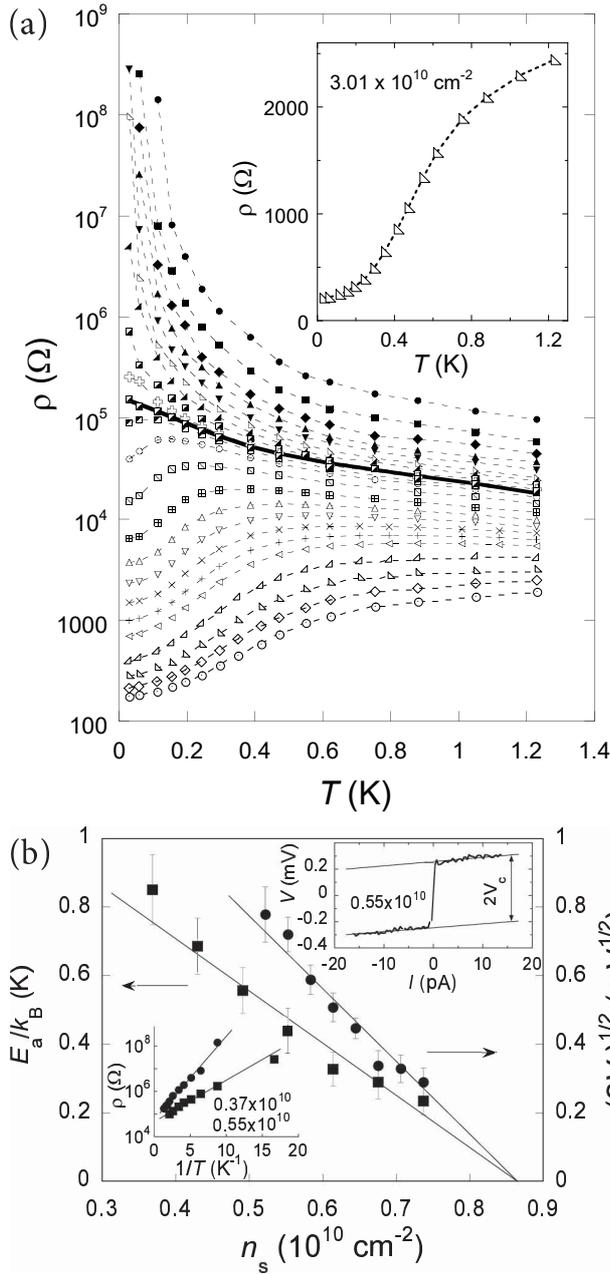


Fig. 1. (a) Temperature dependences of the resistivity in a SiGe/Si/SiGe quantum well in zero magnetic field. The electron densities in units of 10^{10} cm^{-2} (top to bottom) are: 0.37, 0.43, 0.49, 0.55, 0.61, 0.68, 0.74, 0.80, 0.85, 0.88, 0.92, 0.98, 1.17, 1.35, 1.54, 1.72, 1.90, 2.09, 2.27, 2.64, 3.01, 3.38, and 3.75. The solid line corresponds to the separatrix. The inset shows a close-up view of $\rho(T)$ at $n_s = 3.01 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$ displaying a drop of the resistivity by a factor of 12. (b) Activation energy and the square root of the threshold voltage as a function of the electron density in zero magnetic field. Vertical error bars correspond to the experimental uncertainty. The solid lines are linear fits yielding $n_c(0) = 0.87 \pm 0.02 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. Top inset: Current–voltage characteristic measured at a temperature of 30 mK. Bottom inset: Arrhenius plots of the resistivity in the insulating phase for two electron densities. The densities in both insets are indicated in cm^{-2}

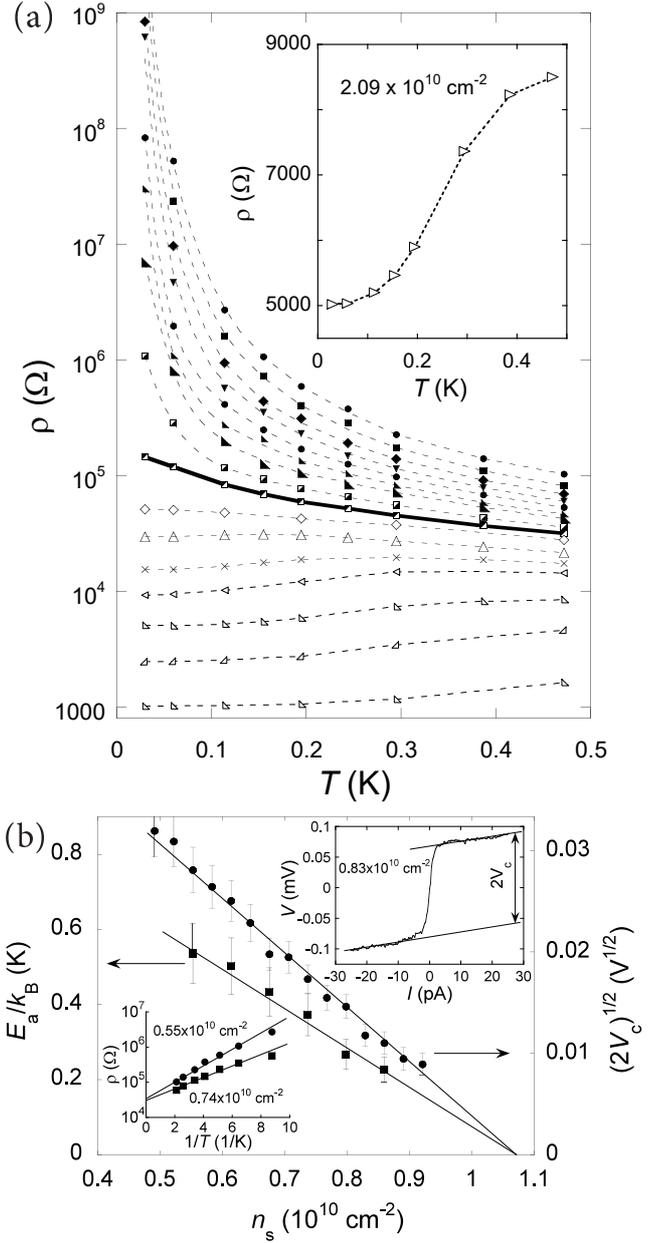


Fig. 2. (a) Resistivity of an electron system in a SiGe/Si/SiGe quantum well placed in the spin-polarizing magnetic field B^* as a function of temperature for electron densities (from top to bottom) 0.55, 0.61, 0.68, 0.74, 0.80, 0.86, 0.92, 1.01, 1.11, 1.22, 1.35, 1.54, 1.72, 2.09, 2.64, and $3.75 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. The solid line corresponds to the separatrix. The magnetic fields used are spanned in the range between approximately 1 and 2 T. The inset shows a closeup view of $\rho(T)$ for $n_s = 2.09 \cdot 10^{10} \text{ cm}^{-2}$. (b) Activation energy, E_a , and square root of the threshold voltage, $V_c^{1/2}$, vs electron density. Solid lines correspond to the best linear fits. Upper inset: a typical I – V dependence on the insulating side of the MIT at $T = 30 \text{ mK}$. Lower inset: Arrhenius plots of the temperature dependence of the resistivity for two electron densities on the insulating side

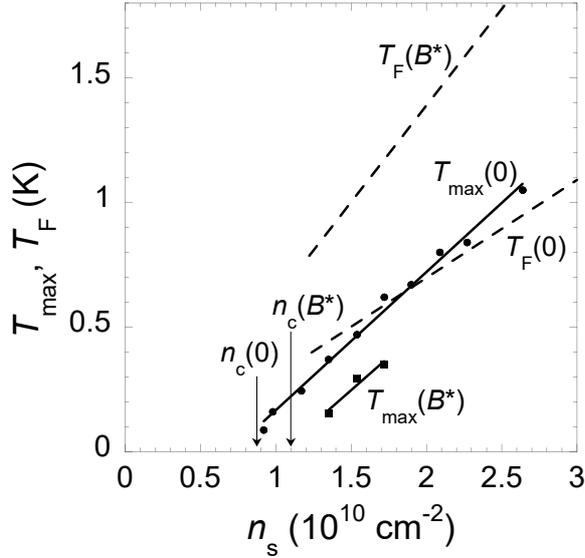


Fig. 3. T_{\max} as a function of electron density in $B = 0$ (circles) and in $B = B^*$ (squares). Solid lines are linear fits. Critical electron densities for the metal–insulator transition in $B = 0$ and $B = B^*$ are indicated. Dashed lines show the Fermi temperatures T_F in $B = 0$ and $B = B^*$ calculated using the low-temperature value B^* and Eq. (1) from the full version of the paper

in the samples used here. The approximately 15 nm wide silicon (001) quantum well is sandwiched between $\text{Si}_{0.8}\text{Ge}_{0.2}$ potential barriers. The samples were patterned in Hall-bar shapes with the distance between the potential probes of 150 μm and width of 50 μm using standard photo-lithography. Measurements were carried out in an Oxford TLM-400 dilution refrigerator. Data on the metallic side of the transition were taken by a standard four-terminal lock-in technique in a frequency range 1–10 Hz in the linear response regime. On the insulating side of the transition, the resistance was measured with dc using a high input impedance electrometer. Since in this regime, the current–voltage (I – V) curves are strongly nonlinear, the resistivity was determined from dV/dI in the linear interval of I – V curves, as $I \rightarrow 0$.

The main part of the full version of the paper is organized as follows. In Sec. 2, using several independent methods, we find that the metal–insulator transition occurs in the strongly-interacting two-valley two-dimensional electron system in ultra-high mobility SiGe/Si/SiGe quantum wells in zero magnetic field. The MIT point and the resistivity drop with decreasing temperature are discussed comparatively to other electron systems. In Sec. 3, we show that the metallic state in ultra-low-disorder SiGe/Si/SiGe quantum wells sur-

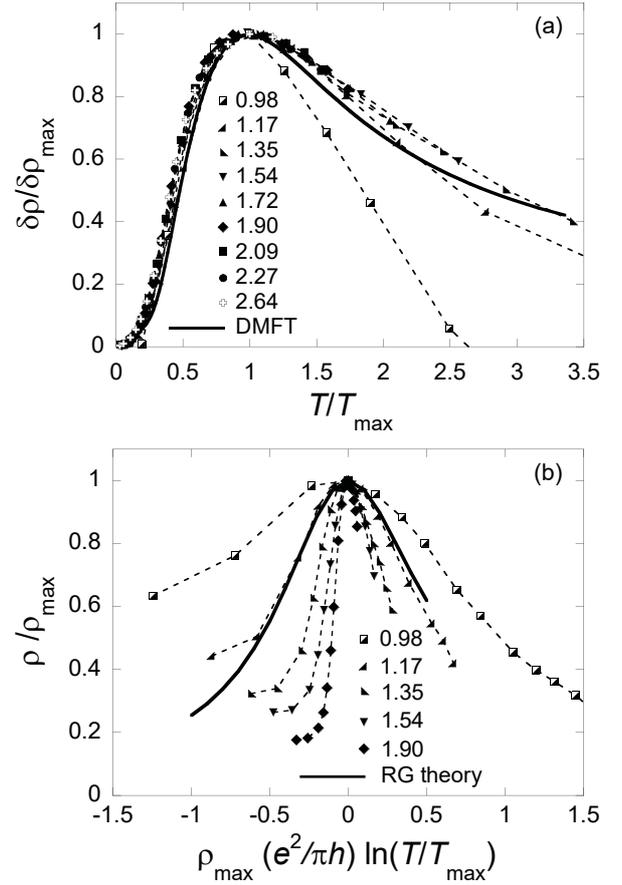


Fig. 4. (a) The ratio $(\rho(T) - \rho(0))/(\rho_{\max} - \rho(0))$ as a function of T/T_{\max} in $B = 0$. The solid line shows the result of the dynamical mean-field theory (DMFT) in the weak-disorder limit [37–39]. The electron densities are indicated in units of 10^{10} cm^{-2} . (b) The ratio ρ/ρ_{\max} as a function of the product $\rho_{\max} \ln(T/T_{\max})$. The solid line is the result of the renormalization-group scaling theory [6, 7]

vives in parallel magnetic fields strong enough to completely polarize the electrons’ spins, thus making the electron system spinless. The behavior of the spinless electrons is discussed and compared to other electron systems. In Sec. 4, we find that the resistivity maximum temperature on the metallic side near the MIT in zero magnetic field in ultra-clean SiGe/Si/SiGe quantum wells is close to the renormalized Fermi temperature but decreases appreciably for spinless electrons in spin-polarizing magnetic fields, rather than increasing along with the Fermi temperature. The discrepancy with existing theories and the origin of the effect are discussed. In Sec. 5, we show that the low-temperature resistivity drop in both spin-unpolarized and spinless electron systems in ultra-clean SiGe/Si/SiGe quan-

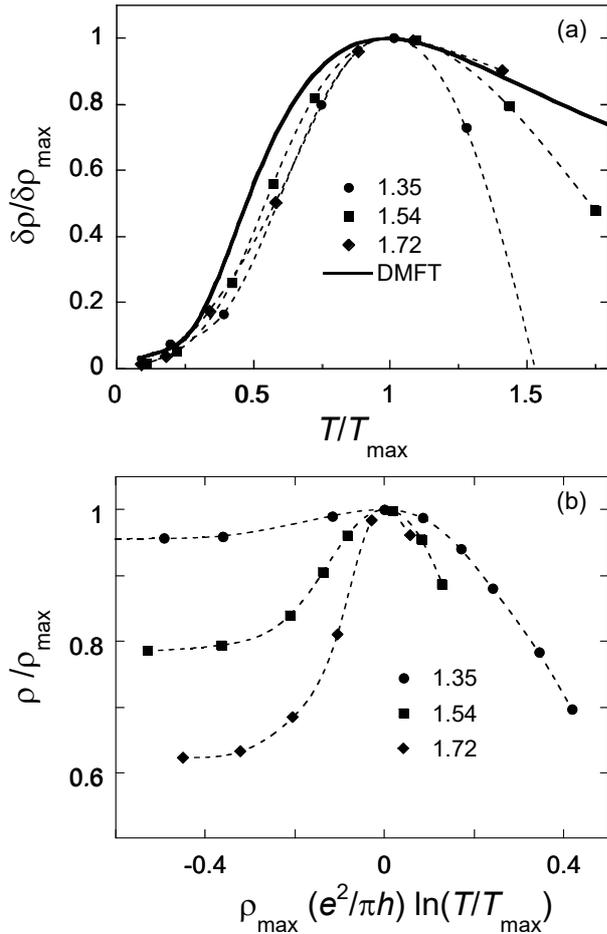


Fig. 5. (a) The ratio $\delta\rho/\delta\rho_{\max}$ plotted as a function of T/T_{\max} in $B = B^*$. The solid line is the result of DMFT in the weak-disorder limit [37–39]. The electron densities are indicated in units of 10^{10} cm^{-2} . (b) The analysis based on the scaling form suggested by the renormalization-group scaling theory [6, 7]

tum wells is described quantitatively by the dynamical mean-field theory.

The results are represented in Figs. 1–5.

The results and discussions are supported by Refs. [1–54].

6. Conclusions. We have found that the metal–insulator transition occurs in the strongly-interacting two-valley two-dimensional electron system in ultra-high mobility SiGe/Si/SiGe quantum wells in zero magnetic field and survives in the spinless system in spin-polarizing magnetic fields. In both cases, this is accompanied by the non-monotonic temperature-dependent resistivity on the metallic side near the transition. In zero magnetic field, the resistivity maximum temperature is found to be close to the renormalized Fermi temperature. However, rather than increasing along with the Fermi temperature, the value T_{\max} decreases ap-

preciably for spinless electrons in spin-polarizing magnetic fields. The observed behavior of T_{\max} cannot be described by existing theories. The results indicate the spin-related origin of the effect. At the same time, the low-temperature resistivity drop in both spin-unpolarized and spinless electron systems is described quantitatively by the dynamical mean-field theory.

Funding. A. A. S. was supported by RSF Grant No. 22-22-00333. S. V. K. was supported by NSF Grant No. 1904024.

The full text of this paper is published in the English version of JETP.

REFERENCES

1. K. Behnia, *Nat. Nanotechnol.* **7**, 488 (2012).
2. Z. Zhu, A. Collaudin, B. Fauqué, W. Kang, and K. Behnia, *Nat. Phys.* **8**, 89 (2012).
3. J. R. Schaibley, H. Yu, G. Clark, P. Rivera, J. S. Ross, K. L. Seyler, W. Yao, and X. Xu, *Nat. Rev. Mater.* **1**, 16055 (2016).
4. Z. Zhu, J. Wang, H. Zuo, B. Fauqué, R. D. McDonald, Y. Fuseya, and K. Behnia, *Nat. Commun.* **8**, 15297 (2017).
5. P. A. Lee and T. V. Ramakrishnan, *Rev. Mod. Phys.* **57**, 287 (1985).
6. A. Punnoose and A. M. Finkel’stein, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 016802 (2001).
7. A. Punnoose and A. M. Finkel’stein, *Science* **310**, 289 (2005).
8. G. Fleury and X. Waintal, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 226803 (2008).
9. T. N. Zavaritskaya and É. I. Zavaritskaya, *JETP Lett.* **45**, 609 (1987).
10. S. V. Kravchenko, G. V. Kravchenko, J. E. Furneaux, V. M. Pudalov, and M. D’Iorio, *Phys. Rev. B* **50**, 8039 (1994).
11. S. V. Kravchenko, W. E. Mason, G. E. Bowker, J. E. Furneaux, V. M. Pudalov, and M. D’Iorio, *Phys. Rev. B* **51**, 7038 (1995).
12. D. Popović, A. B. Fowler, and S. Washburn, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 1543 (1997).
13. A. A. Shashkin and S. V. Kravchenko, *Appl. Sci.* **9**, 1169 (2019).
14. A. A. Shashkin and S. V. Kravchenko, *Ann. Phys.* **435**, 168542 (2021).

15. M. Y. Melnikov, A. A. Shashkin, V. T. Dolgoplov, S.-H. Huang, C. W. Liu, and S. V. Kravchenko, *Appl. Phys. Lett.* **106**, 092102 (2015).
16. M. Y. Melnikov, V. T. Dolgoplov, A. A. Shashkin, S.-H. Huang, C. W. Liu, and S. V. Kravchenko, *J. Appl. Phys.* **122**, 224301 (2017).
17. Y. Hanein, U. Meirav, D. Shahar, C. C. Li, D. C. Tsui, and H. Shtrikman, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 1288 (1998).
18. P. Brussarski, S. Li, S. V. Kravchenko, A. A. Shashkin, and M. P. Sarachik, *Nat. Commun.* **9**, 3803 (2018).
19. A. A. Shashkin, S. V. Kravchenko, V. T. Dolgoplov, and T. M. Klapwijk, *Phys. Rev. B* **66**, 073303 (2002).
20. A. Mokashi, S. Li, B. Wen, S. V. Kravchenko, A. A. Shashkin, V. T. Dolgoplov, and M. P. Sarachik, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 096405 (2012).
21. M. Y. Melnikov, A. A. Shashkin, V. T. Dolgoplov, A. Y. X. Zhu, S. V. Kravchenko, S.-H. Huang, and C. W. Liu, *Phys. Rev. B* **99**, 081106(R) (2019).
22. D. G. Polyakov and B. I. Shklovskii, *Phys. Rev. B* **48**, 11167 (1993).
23. A. A. Shashkin, V. T. Dolgoplov, and G. V. Kravchenko, *Phys. Rev. B* **49**, 14486 (1994).
24. A. A. Shashkin, S. V. Kravchenko, and T. M. Klapwijk, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 266402 (2001).
25. T. Ando, A. B. Fowler, and F. Stern, *Rev. Mod. Phys.* **54**, 437 (1982).
26. A. A. Shashkin, A. A. Kapustin, E. V. Deviatov, V. T. Dolgoplov, and Z. D. Kvon, *Phys. Rev. B* **76**, 241302 (2007).
27. M. Y. Melnikov, A. A. Shashkin, V. T. Dolgoplov, S.-H. Huang, C. W. Liu, A. Y. X. Zhu, and S. V. Kravchenko, *Phys. Rev. B* **101**, 045302 (2020).
28. T. Okamoto, K. Hosoya, S. Kawaji, and A. Yagi, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 3875 (1999).
29. S. A. Vitkalov, H. Zheng, K. M. Mertes, M. P. Sarachik, and T. M. Klapwijk, *Phys. Rev. Lett.* **85**, 2164 (2000).
30. X. P. A. Gao, G. S. Boebinger, A. P. Mills, Jr., A. P. Ramirez, L. N. Pfeiffer, and K. W. West, *Phys. Rev. B* **73**, 241315(R) (2006).
31. V. T. Dolgoplov, A. A. Shashkin, and S. V. Kravchenko, *Phys. Rev. B* **96**, 075307 (2017).
32. A. M. Finkel'stein, *Sov. Phys. JETP* **57**, 97 (1983).
33. A. M. Finkel'stein, *Z. Phys. B* **56**, 189 (1984).
34. C. Castellani, C. Di Castro, P. A. Lee, and M. Ma, *Phys. Rev. B* **30**, 527 (1984).
35. A. Punnoose, A. M. Finkel'stein, A. Mokashi, and S. V. Kravchenko, *Phys. Rev. B* **82**, 201308(R) (2010).
36. S. Anissimova, S. V. Kravchenko, A. Punnoose, A. M. Finkel'stein, and T. M. Klapwijk, *Nat. Phys.* **3**, 707 (2007).
37. A. Camjayi, K. Haule, V. Dobrosavljević, and G. Kotliar, *Nat. Phys.* **4**, 932 (2008).
38. M. M. Radonjić, D. Tanasković, V. Dobrosavljević, K. Haule, and G. Kotliar, *Phys. Rev. B* **85**, 085133 (2012).
39. V. Dobrosavljević and D. Tanasković, in *Strongly Correlated Electrons in Two Dimensions*, ed. by S. V. Kravchenko, Pan Stanford Publ. (2017), ch. 1, p. 1–46.
40. A. A. Shashkin, M. Y. Melnikov, V. T. Dolgoplov, M. M. Radonjić, V. Dobrosavljević, S.-H. Huang, C. W. Liu, A. Y. X. Zhu, and S. V. Kravchenko, *Phys. Rev. B* **102**, 081119(R) (2020).
41. B. Spivak, *Phys. Rev. B* **67**, 125205 (2003).
42. B. Spivak and S. A. Kivelson, *Phys. Rev. B* **70**, 155114 (2004).
43. B. Spivak and S. A. Kivelson, *Ann. Phys.* **321**, 2071 (2006).
44. A. A. Shashkin, M. Y. Melnikov, V. T. Dolgoplov, M. M. Radonjić, V. Dobrosavljević, S.-H. Huang, C. W. Liu, A. Y. X. Zhu, and S. V. Kravchenko, *Sci. Rep.* **12**, 5080 (2022).
45. M. Y. Melnikov, A. A. Shashkin, V. T. Dolgoplov, S.-H. Huang, C. W. Liu, and S. V. Kravchenko, *Sci. Rep.* **7**, 14539 (2017).
46. A. A. Shashkin, S. Anissimova, M. R. Sakr, S. V. Kravchenko, V. T. Dolgoplov, and T. M. Klapwijk, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 036403 (2006).
47. O. Prus, Y. Yaish, M. Reznikov, U. Sivan, and V. Pudalov, *Phys. Rev. B* **67**, 205407 (2003).
48. V. T. Dolgoplov and A. Gold, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 129701 (2002).
49. A. Gold and V. T. Dolgoplov, *J. Phys. Condens. Matter* **14**, 7091 (2002).
50. A. A. Shashkin, *Phys. Usp.* **48**, 129 (2005).
51. N. Tenen, A. Y. Kuntsevich, V. M. Pudalov, and M. Reznikov, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 226403 (2012).
52. V. M. Pudalov, A. Y. Kuntsevich, M. E. Gershenson, I. S. Burmistrov, and M. Reznikov, *Phys. Rev. B* **98**, 155109 (2018).
53. S. V. Kravchenko and M. P. Sarachik, *Rep. Prog. Phys.* **67**, 1 (2004).
54. T. M. Lu, W. Pan, D. C. Tsui, P. C. Liu, Z. Zhang, and Y. H. Xie, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 126403 (2011).

ВЛИЯНИЕ УГЛОВОЙ СИММЕТРИИ ВОЗБУЖДАЮЩЕГО СВЕТОВОГО ПУЧКА НА ДИНАМИКУ МИКРОРЕЗОНАТОРНЫХ ЭКСИТОННЫХ ПОЛЯРИТОНОВ В ТУННЕЛЬНО-СВЯЗАННЫХ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ЛОВУШКАХ

А. А. Деменев^a, В. Д. Кулаковский^{a*}, С. Н. Терешко^a, Н. А. Гиппиус^{b,a}

^a Институт физики твердого тела имени Ю. А. Осипьяна Российской академии наук
142432, Черноголовка, Россия

^b Сколковский институт науки и технологий, ИЦ «Сколково»
143026, Москва, Россия

Поступила в редакцию 20 мая 2022 г.,
после переработки 9 июня 2022 г.
Принята к публикации 10 июня 2022 г.

Исследовано возбуждение пространственных осцилляций экситонных поляритонов в туннельно-связанных симметричных двойных потенциальных ловушках в микрорезонаторах GaAs/AlAs при резонансной пикосекундной накачке когерентными и некогерентными оптическими импульсными пучками с асимметричным угловым распределением. Показано, что нарушение угловой симметрии возбуждающего светового пучка, так же как и нарушение его пространственной симметрии, может быть использовано для возбуждения смешанного состояния симметричной и асимметричной мод в двойной ловушке. При однородном резонансном возбуждении ловушек под оптимальным углом к нормали к микрорезонатору световыми пучками генерируется состояние с разностью фаз мод, равной $\pi/2$, и максимальным средним планарным волновым вектором. Найдено, что динамика поляритонной системы хорошо описывается уравнениями Шредингера с учетом конечного времени жизни поляритонов и потенциала беспорядка в барьере.

Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 95-летию Э. И. Раиба

DOI: 10.31857/S0044451022100054

EDN: ENJUJL

1. ВВЕДЕНИЕ

Экситонные поляритоны в полупроводниковых микрорезонаторах (МР) — бозонные квазичастицы, образующиеся при взаимодействии света и экситонов в режиме сильной экситон-фотонной связи [1–4]. Большой интерес к поляритонным системам обусловлен тем, что они демонстрируют когерентные свойства при относительно низких плотностях около 10^{10} см⁻² и высоких, вплоть до комнатных, температурах благодаря очень малой эффективной массе (меньше чем $10^{-4}m_e$), обусловленной наличием фотонной компоненты. Двойная — экситон-фотонная — природа поляритонов открывает большие перспективы не только для фундаментальных ис-

следований физики многих тел, но для их использования в полностью оптических устройствах. Наличие фотонной компоненты в экситонных поляритонах открывает широкие возможности использования оптических методик для непосредственного формирования поляритонных систем с априори заданными не только различными пространственными и спектральными характеристиками, но и пространственно-временной когерентностью.

В последние годы активно исследуются квантовые явления в туннельно-связанных поляритонных конденсатах, обладающих макроскопической фазовой когерентностью. В работах [5–13] был исследован целый ряд различных динамических режимов, реализующихся в экситон-поляритонных конденсатах в двойных туннельно-связанных потенциальных ловушках в полупроводниковых МР при различных соотношениях энергий туннельной связи двух конденсатов и межчастичного взаимодействия. Поля-

* E-mail: kulakovs@issp.ac.ru

ритонные конденсаты, возбуждаемые в двойных потенциальных ловушках (ДПЛ) в основном линейно поляризованном состоянии, как правило, сохраняют поляризацию, что позволяет использовать для описания их временной эволюции систему двух связанных скалярных уравнений Шредингера [14, 15]

$$i\hbar \frac{d\psi_L}{dt} = (E_L^0 + U|\psi_L|^2)\psi_L + J\psi_R, \quad (1)$$

$$i\hbar \frac{d\psi_R}{dt} = (E_R^0 + U|\psi_R|^2)\psi_R + J\psi_L, \quad (2)$$

где $\psi_{L,R}$ — бозонные волновые функции поляритонов, локализованных слева (L) и справа (R) от барьера, $E_{L,R}^0$ — их одночастичные энергии, U и J — константы соответственно межчастичного и туннельного взаимодействий. Эти уравнения аналогичны уравнениям, описывающим динамику двух связанных нелинейных осцилляторов, хорошо известны и широко применяются во многих областях физики.

В отсутствие межчастичного взаимодействия, т.е. в отсутствие нелинейных поправок, система уравнений (1) и (2) может быть диагонализирована. В случае одинаковых ловушек с $E_L = E_R = E_0$ туннельное взаимодействие приводит к расщеплению поляритонных состояний на симметричное $\psi_S = (\psi_L + \psi_R)/\sqrt{2}$ и антисимметричное $\psi_A = (\psi_L - \psi_R)/\sqrt{2}$ с энергиями соответственно $E_S = E_0 - J$ и $E_A = E_0 + J$. В системе, созданной в виде линейной комбинации состояний ψ_S и ψ_A , возникают осцилляции плотности поляритонов между двумя ловушками с разностной частотой $2J$. Этой комбинации отвечают состояния с разной плотностью поляритонов в ловушках, поэтому для ее формирования, как правило, используется возбуждение поляритонов световыми импульсами только в одной ловушке или импульсами разной мощности в двух ловушках. В то же время следует отметить, что при резонансном фотовозбуждении поляритонов в ДПЛ их симметрия позволяет генерировать поляритонную систему в виде комбинации S - и A -состояний также при фотовозбуждении двух ловушек световым импульсным пучком с одинаковой интенсивностью на ловушках, но нарушенной угловой симметрией относительно нормали к плоскости МР.

В данной работе исследуются пространственные осцилляции поляритонов в туннельно-связанных симметричных ДПЛ в МР GaAs/AlAs с квантовыми ямами (InGa)As в активной области при резонансном возбуждении под углом к нормали МР когерентными и некогерентными пикосекундными импульсными световыми пучками с энергией квантов $\hbar\omega_p = E_{LP}(k=0)$, где E_{LP} — энергия поляритонов

с нулевым волновым вектором k на нижней поляритонной ветви. Энергии уровней поляритонов в ловушке находятся на глубине не более 200 мкэВ относительно $E_{LP}(k=0)$, спектральная ширина возбуждающих импульсов около 1 мэВ. Поэтому заполнение поляритонных состояний в ДПЛ происходит как вследствие резонансного возбуждения локализованных состояний, так и вследствие локализации в них свободных поляритонов, фотовозбужденных вблизи дна поляритонной зоны.

В исследованиях было показано, что нарушение угловой симметрии возбуждающего импульсного светового пучка, так же как и нарушение его пространственной симметрии, может быть использовано для возбуждения смешанного состояния $\alpha\psi_S + \beta\psi_A$. При этом, если при импульсном возбуждении в ДПЛ только одной ловушки реализуется состояние с разностью фаз $\Delta\phi$ волновых функций ψ_S и ψ_A , кратной π , и нулевым средним волновым вектором поляритонов, то при одинаковой импульсной резонансной накачке двух ловушек под углом к нормали к плоскости МР реализуется нестационарное макрозанное состояние с ненулевыми $\langle k \rangle$ и разностью фаз $\Delta\phi$.

2. МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА И ОБРАЗЦЫ

В работе исследована экситон-поляритонная система в МР 2λGaAs/AlAs, выращенном методом молекулярно-лучевой эпитаксии на подложке GaAs с ориентацией [100]. Верхнее (нижнее) брэгговское зеркало состоит из 25 (29) слоев AlAs и GaAs, что обеспечивает высокую добротность МР. В активной области МР находятся четыре набора из трех квантовых ям In_{0.05}Ga_{0.95}As толщиной 10 нм, разделенных барьерами из GaAs толщиной 10 нм. Расщепление Раби составляет 7.5 мэВ. Для резонансного возбуждения поляритонов на нижней поляритонной ветви использовался перестраиваемый пикосекундный Ti-сапфировый лазер с синхронизацией мод (частота повторения импульсов 80 МГц, длительность 2 пс). Для генерации поляритонов использовалось как когерентное, так и некогерентное фотовозбуждение. Нарушение пространственной когерентности лазерного пучка осуществлялось его пропусканием через 25-метровый многомодовый световод диаметром 400 мкм, скрученный в 15 петель типа восьмерки. Пикосекундные лазерные импульсы фокусировались на его вход. Выходящие из световода импульсы света имели длительность около 10 пс

и содержали большое число волноводных мод, выходящих под разными углами и формирующих муаровую картину. Длина когерентности лазерного луча в пятне фокусировки накачки на образце, измеренная с использованием интерференционной методики, описанной в работе [16], не превышала 1.5 мкм.

Поляритоны возбуждались на нижней поляритонной (LP) ветви сходящимся лазерным пучком из пикосекундных импульсов с энергией квантов $\hbar\omega_p = E_{LP}(k=0)$ в широкой области волновых векторов поляритонов $|k| < 1 \text{ мкм}^{-1}$ благодаря большой спектральной ширине лазерных импульсов накачки (порядка 1 мэВ) и однозначной связи \mathbf{k} с углом падения квантов света θ , $k_{x(y)} = -2\pi/\lambda \sin \theta_{x(y)}$. Контроль возбуждаемой области \mathbf{k} осуществлялся выбором угла падения светового конуса лазерного луча на МР. Для возбуждения поляритонов в области $k_x > 0$ и $k_x < 0$ использовалось возбуждение в области соответственно $\theta < 0$ и $\theta > 0$.

Излучение поляритонов регистрировалось с обратной стороны образца, что позволяло избежать вклада от рассеянного света импульса накачки. Для записи время-разрешенных спектров излучения использовалась стрик-камера, позволяющая регистрировать сигнал с временным разрешением 3 пс. Временная эволюция поляритонной системы в k -пространстве находилась из время-разрешенных измерений углового распределения ее излучения с разрешением 0.4° , обеспечивающим разрешение в k -пространстве 0.05 мкм^{-1} .

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

3.1. Энергетические уровни и размеры ловушек в ДПЛ

Пространственные флуктуации ширины квантовых ям (InGa)As и содержания индия в них неизбежно приводят к соответствующим флуктуациям энергии поляритонного резонанса E_{LP} . В исследованиях пространственного распределения интенсивности излучения поляритонов в МР с разрешением 1.5 мкм нами было найдено, что наряду с областями с малым потенциалом беспорядка размером до 200 мкм, в которых пространственные флуктуации интенсивности излучения поляритонов находятся в пределах 15–20 %, в МР имеются также области с относительно глубокими ловушками размером 5–10 мкм, интенсивность излучения из которых в 1.5–2 раза превышает интенсивность излучения из окружающего барьера.

Для исследования резонансно возбуждаемых поляритонных систем нами были выбраны ДПЛ с близко расположенными ловушками примерно одинаковых размеров (около 5 мкм), в которых благодаря относительно большой константе туннельной связи $J \approx 50 \text{ мкэВ}$ период осцилляций плотности поляритонов между ловушками $T \approx 40 \text{ пс}$, с одной стороны, много меньше времени жизни поляритонов ($\tau_{LP} \approx 170 \text{ пс}$), а с другой, много больше временного разрешения (примерно 3 пс).

Энергии поляритонных уровней в ДПЛ были определены из время-разрешенных измерений спектров излучения поляритонов из ДПЛ и барьеров со спектральным разрешением $\Delta\hbar\omega = 35 \text{ мкэВ}$ при резонансном фотовозбуждении пикосекундными импульсами с энергией $\hbar\omega_p = E_{LP}(k=0)$. Спектры излучения поляритонов $I(\hbar\omega)$ из ДПЛ, а также из барьера на расстоянии 10 мкм от ДПЛ показаны на рис. 1а. В обоих случаях поляритоны возбуждались в пятне диаметром 12 мкм, а регистрация спектров выполнялась в интервале времен задержки $t = 270 \pm 40 \text{ пс}$.

На рис. 1а видно, что к этому времени в области ДПЛ доминируют поляритоны, локализованные в ловушках. В барьере при такой задержке также остаются в основном поляритоны, локализованные в потенциале беспорядка, поскольку свободные поляритоны с энергией $E_{kin} \gtrsim 100 \text{ мкэВ}$, скорость которых превышает 0.4 мкм/пс, заведомо успевают убежать за пределы возбуждаемого пятна. Об этом свидетельствует как малая ($135 \pm 3 \text{ мкэВ}$) полная ширина на полувысоте линии LP , обусловленная излучением поляритонов из барьера, так и ее затянутый красный край: ширина линии LP на полувысоте с красной стороны от максимума (65 мкэВ) лишь немного меньше, чем с фиолетовой (70 мкэВ). Из спектров излучения на рис. 1а следует, что в ДПЛ имеются два уровня, расположенных на 165 ± 3 и $69 \pm 3 \text{ мкэВ}$ ниже уровня поляритона в барьере.

Пространственный размер ДПЛ был также определен из время-разрешенных измерений распределения излучения поляритонов. С целью избежать вклада от излучения резонансно возбужденных свободных поляритонов в области ДПЛ спектр излучения записывался при больших временах задержки в интервале $t = 265 \pm 43 \text{ пс}$. Интенсивность излучения поляритонов вдоль оси ДПЛ (ось x), $I_{LP}(x)$, при возбуждении линейно поляризованными вдоль оси x лазерными импульсами длительностью 2 пс в световом конусе под углом $\theta_x = -4^\circ \pm 2^\circ$ к нормали к МР показана на рис. 1б (кривая L+R). Дополни-

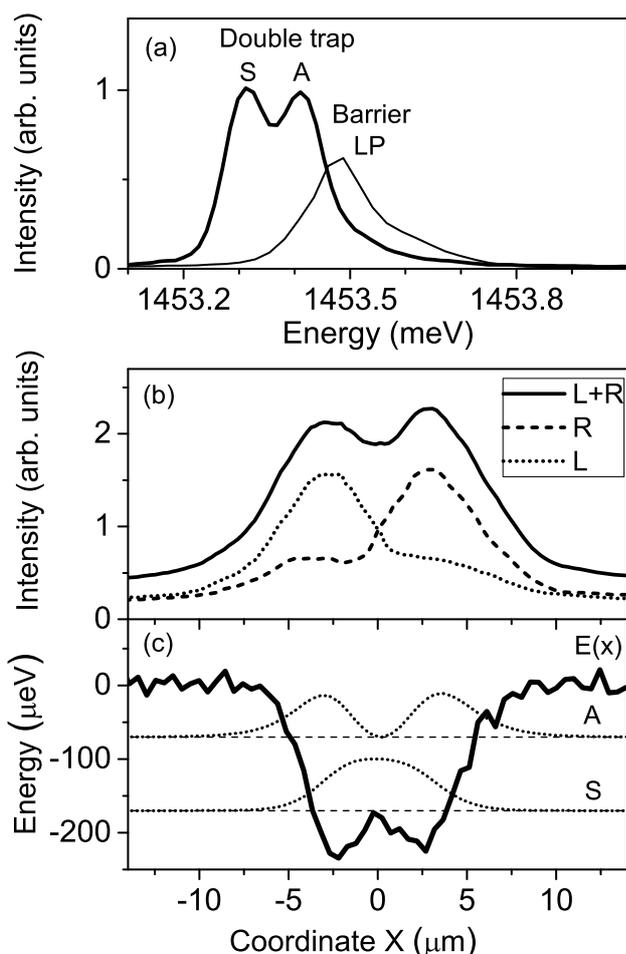


Рис. 1. Спектры излучения поляритонов из ДПЛ и барьера на расстоянии 10 мкм от ДПЛ в интервале времен задержки $t = 270 \pm 40$ пс (а) и интенсивности излучения поляритонов $I_{LP}(x)$ вдоль оси ДПЛ (ось x) при возбуждении импульсами, линейно поляризованными вдоль оси x , в интервале времен задержки $t = 265 \pm 43$ пс (кривая L+R) и в моменты максимального заполнения левой ($t = 254$ пс, кривая L) и правой ($t = 276$ пс, кривая R) ловушек (b), записанные из центральной полоски шириной 2 мкм вдоль ДПЛ при резонансном возбуждении когерентными лазерными импульсами длительностью 2 пс в световом конусе под углом $\theta_x = -4^\circ \pm 2^\circ$ к нормали к плоскости МР. На рис. 1с показан потенциал поляритонов в ДПЛ, $E(x)$, смоделированный на основе определенных из эксперимента энергий локализованных уровней (рис. 1а) и пространственных размеров ловушек (рис. 1b) с учетом потенциала беспорядка. Штриховыми и пунктирными линиями показаны соответственно энергии и плотности локализованных состояний поляритонов

тельно из время-разрешенных спектров в условиях осцилляции плотности поляритонов между ловушками в ДПЛ было зарегистрировано пространственное распределение излучения в моменты максималь-

ного заполнения левой и правой ловушек (соответственно кривые L и R на рис. 1b). На рис. 1b видно, что линейный размер ДПЛ вдоль ловушек близок к 13 мкм, а размер каждой составляет 5–6 мкм.

3.2. Временная эволюция поляритонов в ДПЛ при импульсном однородном резонансном фотовозбуждении

3.2.1. Эксперимент

На рис. 2 показаны временные эволюции пространственного (рис. 2a) и углового (рис. 2b) распределений интенсивности излучения поляритонов из области ДПЛ вдоль ее оси, $I_{LP}(x, t)$, измеренные при когерентном возбуждении линейно поляризованными вдоль оси x лазерными импульсами длительностью 2 пс в пятне диаметром 30 мкм в интервале углов $-6^\circ < \theta_x < -2^\circ$ ($\langle k_x \rangle \approx 0.5 \text{ мкм}^{-1}$). ДПЛ находится в центре возбуждаемого пятна. Излучение регистрируется с помощью стрик-камеры из центральной полоски шириной 2 мкм вдоль оси x . На рис. 2a видно, что излучение из ДПЛ демонстрирует ярко выраженные пространственно-временные осцилляции, свидетельствующие о перераспределении плотности поляритонов между двумя ловушками. Пространственные осцилляции сопровождаются осцилляциями углового распределения излучения поляритонов, которые отражают осцилляции их распределения в k -пространстве, с таким же периодом.

Найденные из $I_{LP}(x, t)$ временные зависимости интегральных интенсивностей излучения из левой ($-5 \text{ мкм} < x < -0.5 \text{ мкм}$) и правой ($0.5 \text{ мкм} < x < 5 \text{ мкм}$) ловушек, соответственно I_L и I_R , и из прилегающих к ним областей барьеров $-9 \text{ мкм} < x < -6 \text{ мкм}$ (I_{Lb}) и $6 \text{ мкм} < x < 9 \text{ мкм}$ (I_{Rb}), а также из обеих ловушек, I_{L+R} , приведены на рис. 3a. Интенсивности излучения нормированы на площадь измеряемой области и отвечают средней плотности поляритонов в соответствующих областях.

На вставке на рис. 3a видно, что к моменту окончания возбуждающего импульса ($t \approx 4$ пс) $I_L \approx I_R$, что свидетельствует о примерно одинаковой плотности поляритонов n_{LP} в этих ловушках. На вставке также видно, что вплоть до $t \approx 3$ пс интенсивности излучения из барьеров, $I_{Lb}(t)$ и $I_{Rb}(t)$, близки и примерно в 2.5 раза меньше интенсивностей излучения поляритонов из ловушек. Большая интенсивность излучения поляритонов из области ДПЛ обусловлена вкладом от резонансного возбуждения

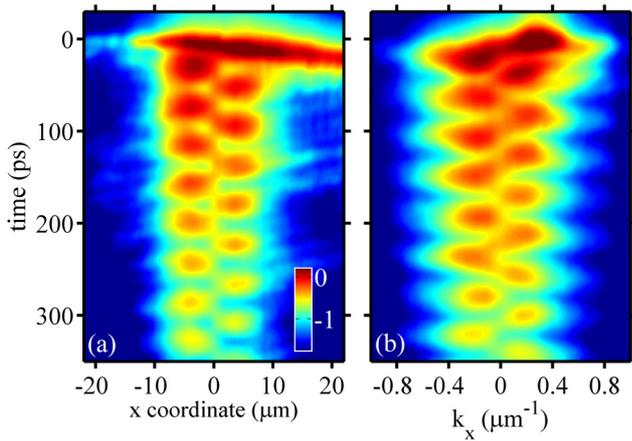


Рис. 2. Эволюции пространственного (a) и углового (b) распределений интенсивности излучения поляритонов из области ДПЛ вдоль ее оси при когерентном возбуждении линейно поляризованными вдоль оси x лазерными импульсами длительностью 2 пс в пятне диаметром 30 мкм в интервале углов $-6^\circ < \theta_x < -2^\circ$ ($\langle k_x \rangle \approx 0.5 \text{ мкм}^{-1}$). ДПЛ находится в центре возбуждаемого пятна. Излучение регистрируется с помощью стрик-камеры из центральной полоски шириной 2 мкм вдоль оси x

в ней локализованных состояний лазерным импульсом со спектральной шириной около 1 мэВ. На рисунке также видно, что после окончания импульса накачки интенсивность излучения поляритонов резко уменьшается только из левого барьера, интенсивности I_L , I_R и I_{Rb} продолжают возрастать еще в течение соответственно 2.2, 7.4 и 13.5 пс.

Быстрое уменьшение концентрации поляритонов в левом барьере в первые 15 пс обусловлено их убеганием в сторону ДПЛ: поляритоны в области $x > -15 \text{ мкм}$ возбуждаются со средней скоростью $v_x \approx 0.8 \text{ мкм/пс}$. При $t > 15 \text{ пс}$ в левом барьере остаются поляритоны, локализовавшиеся в потенциале беспорядка и частично рассеиваемые из ДПЛ. Приток последних осциллирует из-за осцилляции концентрации в ловушках, поэтому I_{Lb} уменьшается с небольшими осцилляциями со временем затухания $\tau_{Rb} \approx \tau_{Lb} \approx 170 \text{ пс}$.

На рис. 2a и 3a видно, что затухание интенсивностей излучения в ловушках происходит с ярко выраженными осцилляциями, сдвинутыми на полпериода друг относительно друга. Уменьшение концентрации поляритонов, локализованных в ДПЛ, $n_{LP}^*(t) = n_{LP,L}(t) + n_{LP,R}(t)$, после резкого спада при $t \lesssim 15 \text{ пс}$, обусловленного утеканием свободных поляритонов в правый барьер, происходит экспоненциально со временем жизни поляритонов $\tau_{LP} = 170 \text{ пс}$.

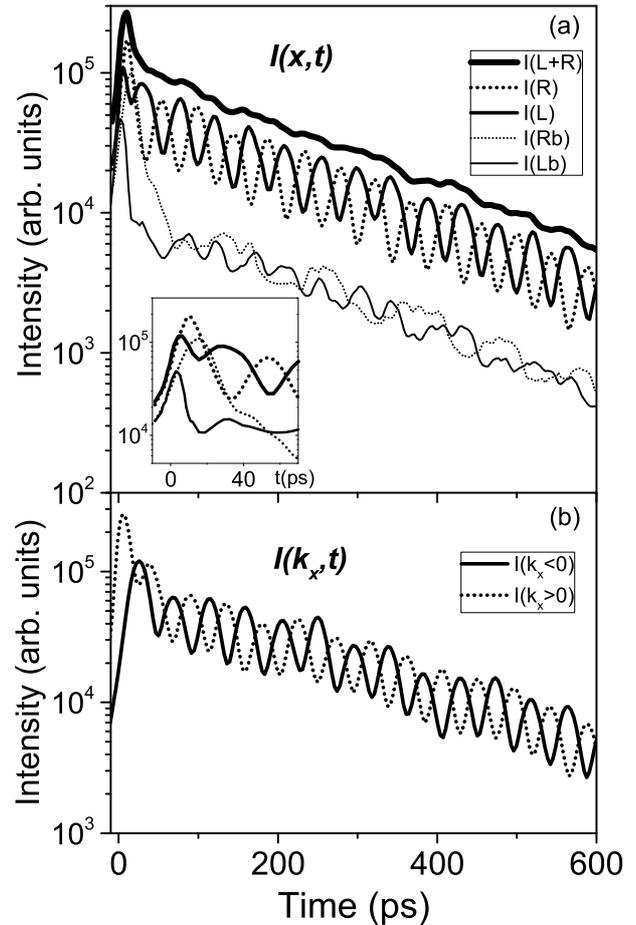


Рис. 3. (a) Временная динамика интегральных интенсивностей излучения из левой ($-5 \text{ мкм} < x < -0.5 \text{ мкм}$) и правой ($0.5 \text{ мкм} < x < 5 \text{ мкм}$) ловушек, I_L и I_R , и из прилегающих к ним областей барьеров $-9 \text{ мкм} < x < -6 \text{ мкм}$ (I_{Lb}) и $6 \text{ мкм} < x < 9 \text{ мкм}$ (I_{Rb}), а также из обеих ловушек, I_{L+R} . Интенсивности излучения нормированы на площадь измеряемой области и отвечают средней плотности поляритонов в соответствующих областях. Момент $t = 0$ соответствует приходу лазерного импульса. (b) Временная динамика интегральных интенсивностей излучения поляритонов с $k_x > 0$ и $k_x < 0$, извлеченных из зависимости $I(k_x, t)$ на рис. 2b

Временное поведение интенсивностей излучения поляритонов из ДПЛ в областях $k_x > 0$ и $k_x < 0$, извлеченное из зависимости $I_{LP}(k_x, t)$ на рис. 2b, показано на рис. 3b. Пикосекундный импульс, падающий на МР под углом $\theta_x < 0$, возбуждает в основном поляритоны с $k_x > 0$. В дальнейшем наблюдаются осцилляции $I_{LP}(k_x)$ в k -пространстве между областями $k_x > 0$ и $k_x < 0$, сдвинутые на $\pi/2$ относительно осцилляций плотности поляритонов между ловушками. Амплитуды осцилляций в прямом и обратном пространствах примерно одинаковы.

Зависимости от времени среднего волнового вектора поляритонов $\langle k_x \rangle(t)$ и разности величин $I_L(t)$ и $I_R(t)$, нормированной на их сумму,

$$\rho_{LR}(t) = \frac{I_L(t) - I_R(t)}{I_L(t) + I_R(t)} = \frac{n_{LP,L}(t) - n_{LP,R}(t)}{n_{LP,L}(t) + n_{LP,R}(t)},$$

показаны на рис. 4а, б. На рисунке видно, что пикосекундный импульс возбуждает поляритоны с одинаковой плотностью в ловушках и $\langle k_x \rangle = 0.3 \text{ мкм}^{-1}$, а в дальнейшем поляритоны осциллируют между ловушками со средней амплитудой осцилляций 40 % и величиной $\langle k_x \rangle$ между -0.2 и $+0.2 \text{ мкм}^{-1}$.

Пространственные осцилляции концентрации поляритонов в туннельно-связанных ловушках обусловлены интерференцией поляритонных мод S и A . Период осцилляций интенсивностей излучения из ловушек $T \approx 43 \pm 1 \text{ пс}$ полностью соответствует

величине расщепления поляритонных состояний в ДПЛ: $2\pi/T \approx 96 \text{ мэВ}$.

В условиях однородной и симметричной по углам накачки эффективно возбуждается только симметричное состояние, возбуждение же асимметричного состояния требует асимметрии накачивающего светового пучка. С этой целью обычно используют разные плотности накачки двух ловушек. Наблюдаемые в эксперименте осцилляции интенсивностей $I_L(t)$ и $I_R(t)$ при одинаковой резонансной накачке обеих ловушек свидетельствуют о том, что нарушение угловой симметрии возбуждающего светового пучка, так же как и нарушение его пространственной симметрии, может быть использовано для возбуждения макрозаполненного смешанного состояния $\alpha\psi_S + \beta\psi_A$. При возбуждении в ДПЛ только одной ловушки реализуется состояние с разностью фаз волновых функций ψ_S и ψ_A , кратной π , и нулевым значением $\langle k \rangle$ поляритонов в ДПЛ, в то время как при одинаковом возбуждении двух ловушек световыми импульсами с $\theta_x \neq 0$ при оптимальных условиях реализуется нестационарное состояние с $\langle k_x \rangle \neq 0$ и разностью фаз двух мод, равной $\pi/2$. Иными словами, в первом случае реализуется состояние с максимальной локализацией в прямом пространстве, а во втором — в обратном.

3.2.2. Теория

Для моделирования пространственно-временной динамики поляритонов в ДПЛ, возбуждаемых асимметричными по k_x пространственно-однородными импульсами, мы использовали одномерные уравнения Шредингера с учетом конечного времени жизни поляритонов. Потенциал $E(x)$ был смоделирован на основе определенных из эксперимента энергий локализованных уровней и пространственных размеров ловушек (см. рис. 1). Кроме того, было учтено наличие потенциала беспорядка в барьере, приводящего к дополнительному рассеянию поляритонов в барьере. Форма потенциала, а также рассчитанные энергии и поляритонные плотности показаны на рис. 1с. На рис. 5 представлены рассчитанные для ДПЛ с потенциалом $E(x)$, приведенном на рис. 1с, зависимости $I_{LP}(x, t)$ (рис. 5а) и $I_{LP}(k_x, t)$ (рис. 5б) при возбуждении поляритонов когерентными 2-пс импульсами в области $|x| < 15 \text{ мкм}$ под углом $\theta_x = -4^\circ \pm 2^\circ$ к нормали к плоскости МР, а извлеченные из них зависимости $\langle k_x \rangle(t)$ и $\rho_{LR}(t)$ показаны на рис. 4а, б пунктирными линиями.

Сравнение рассчитанных зависимостей $I_{LP}(x, t)$ и $I_{LP}(k_x, t)$ с экспериментальными на рис. 2, а также рассчитанных и измеренных зависимостей $\langle k_x \rangle(t)$

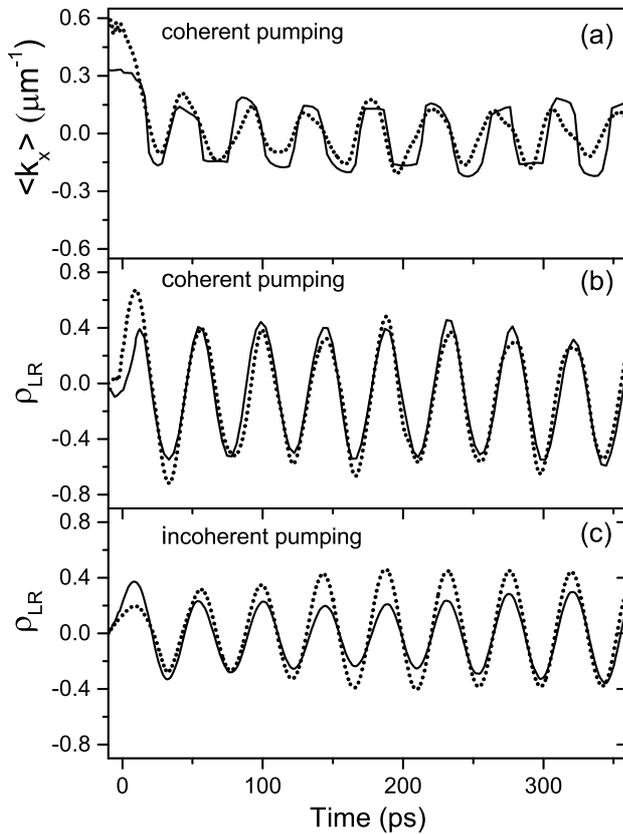


Рис. 4. Зависимости от времени $\langle k_x \rangle$ (а) и $\rho_{LR} = (I_L(t) - I_R(t))/(I_L(t) + I_R(t))$ (б) при пикосекундном резонансном когерентном фотовозбуждении в области $|x| < 15 \text{ мкм}$ и (с) зависимости $\rho_{LR}(t)$ при возбуждении лазерными импульсами с нарушенной когерентностью ($l_{coh} = 1.5 \text{ мкм}$). Эксперимент — сплошные линии, расчет — пунктир

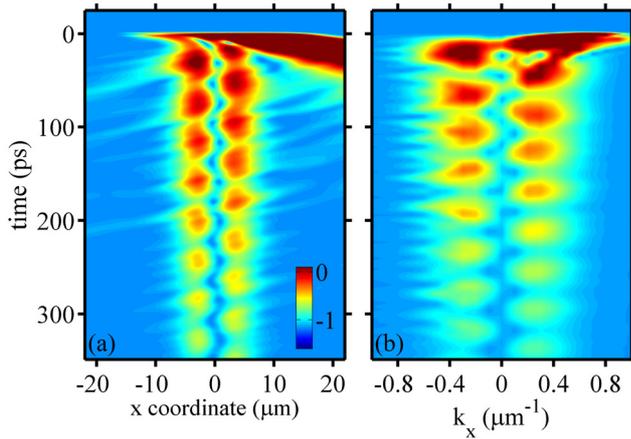


Рис. 5. Зависимости $I_{LP}(x,t)$ (a) и $I_{LP}(k_x,t)$ (b), рассчитанные для ДПЛ с потенциалом $E(x)$, приведенным на рис. 1с, при возбуждении поляритонов когерентными 2-пс лазерными импульсами в области $|x| < 15$ мкм под углом $\theta_x = -4^\circ \pm 2^\circ$ к нормали к плоскости МР

и $\rho_{LP}(t)$ на рис. 4а, b показывает, что используемая упрощенная модель хорошо описывает наблюдаемую динамику поляритонной системы в ДПЛ. Можно только отметить заметно меньший провал интенсивности излучения в промежутке между ловушками в измеренных зависимостях $I_{LP}(x,t)$ и вблизи $k_x = 0$ в $I_{LP}(k_x,t)$. Частично это связано с недостаточным пространственным и угловым разрешениями в эксперименте: $\delta x \approx 1.5$ мкм и $\delta k_x \approx 0.05$ мкм⁻¹. На рис. 4а, b видно, что в рамках модели, так же как и в эксперименте, резонансная накачка пикосекундным импульсом создает в ловушках двухмодовое состояние с равными плотностями поляритонов, характеризующееся разностью фаз двух мод, равной $\pi/2$. Далее видно, что основная часть фотозвужденных свободных поляритонов покидает область ДПЛ в течение 15 пс (рис. 5), а осцилляционная динамика сформированного в ДПЛ когерентного состояния полностью определяется интерференцией макрозаполненных состояний S и A , опустошающихся без нарушения когерентности со временем жизни поляритонов. Кроме того, на рис. 4а, b видно, что упрощенная модель хорошо воспроизводит амплитуды осцилляций как концентраций поляритонов в ловушках, так и $\langle k_x \rangle$.

3.3. Влияние нарушения когерентности возбуждающих импульсов на динамику поляритонов в ДПЛ

Выше рассматривалась динамика поляритонной системы в ДПЛ при резонансном возбуждении когерентными импульсами, обеспечивающем генера-

цию двух поляритонных состояний с разностью фаз $\Delta\phi = \pi/2$, сохраняющейся от импульса к импульсу. При использовании световых пучков с пониженной когерентностью естественно ожидать отклонения разности фаз возбуждаемых мод от $\pi/2$ из-за случайных флуктуаций пространственного распределения плотности пучка в накачиваемом пятне. Флуктуации $I_p(x)$ от импульса к импульсу должны вести к соответствующим флуктуациям $\Delta\phi$ и, как следствие, к невоспроизводимости зависимостей $I_{LP}(x,t)$ и $I_{LP}(k_x,t)$ от импульса к импульсу.

Для оценки величины этого эффекта нами были рассчитаны зависимости $I_{LP}(x,t)$ и $I_{LP}(k_x,t)$ для нескольких случайных распределений электромагнитного поля в возбуждающих импульсах с длиной когерентности, пониженной до $l_c = 1.5$ мкм, много меньшей размера ДПЛ. Рассчитанные зависимости при резонансном возбуждении ДПЛ под углом 4.5° к нормали МР в пятне диаметром 50 мкм случайными одиночными оптическими импульсами с нарушенной когерентностью показаны на рис. 6.

На рис. 6 видно, что пространственные флуктуации $I_p(x)$ в некогерентном импульсе накачки, как и ожидалось, ведут, с одной стороны, к нарушению равенства начальных концентраций полярито-

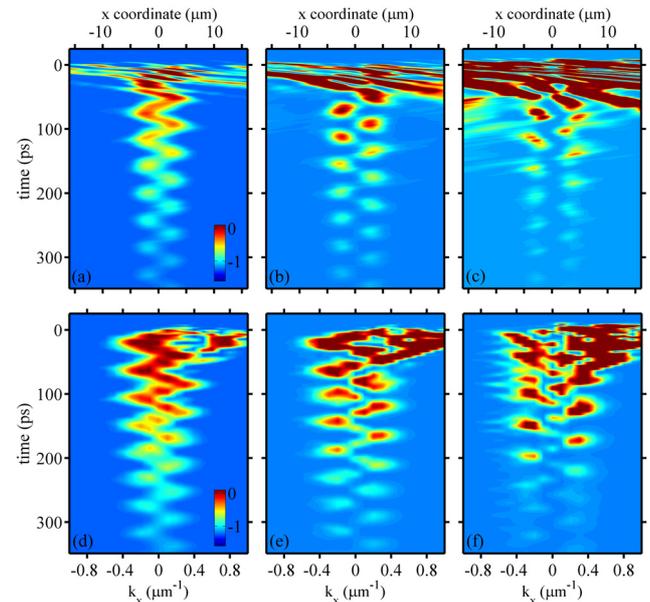


Рис. 6. Зависимости $I_{LP}(x,t)$ (a-c) и $I_{LP}(k_x,t)$ (d-f), рассчитанные для ДПЛ с потенциалом $E(x)$, приведенным на рис. 1с, при резонансном возбуждении поляритонов под углом к нормали $\langle\theta_x\rangle = -4.5^\circ$ в пятне диаметром 50 мкм случайными одиночными 10-пс лазерными импульсами с нарушенной когерентностью (длина когерентности 1.5 мкм)

нов в ловушках, а с другой, к невоспроизводимости зависимостей $I_{LP}(x, t)$ и $I_{LP}(k_x, t)$ от импульса к импульсу. Неизменным остается только период осцилляций, однозначно связанный с величиной расщепления поляритонных мод в ДПЛ. Поскольку флуктуации интегральных плотностей возбуждения ловушек при использовании некогерентных импульсов с длиной когерентности, много меньшей их размера, относительно невелики, то можно ожидать, что усредненные по большому количеству импульсов зависимости $\langle I_{LP}(x, t) \rangle$ и $\langle I_{LP}(k_x, t) \rangle$ будут мало отличаться от реализующихся при когерентном возбуждении.

Измеренные (усреднение по 10^7 импульсов) временные эволюции пространственного и импульсного распределений излучения из ДПЛ при резонансном возбуждении импульсными пучками с нарушенной пространственной когерентностью (длина когерентности 1.5 мкм) в пятне диаметром 50 мкм под углом к нормали к плоскости МР $\langle \theta_x \rangle = -4.5^\circ$ показаны на рис. 7а, б, а усредненные по 50 импульсам рассчитанные распределения — на рис. 7с, д, соответственно. Извлеченные из них зависимости ρ_{LR} показаны на рис. 4с. Сравнение приведенных на рис. 7 экспериментальных и рассчитанных усредненных зависимостей $I_{LP}(x, t)$ и $I_{LP}(k_x, t)$ с наблюдаемыми и рассчитанными при возбуждении когерентным светом (соответственно рис. 2 и 5) показывает, что, как и ожидалось, при возбуждении некогерентными импульсами сохраняются отчетливые осцилляции интенсивности излучения между ловушками в реальном пространстве и между состояниями с $k_x > 0$ и $k_x < 0$ в обратном. Несколько большая длительность излучения поляритонов из барьера при возбуждении некогерентными пучками света обусловлена их большей длительностью: в процессе уменьшения пространственной когерентности 2-пс импульса с использованием многомодового световода его длительность возрастает до 10 пс.

Более детальное сравнение приведенных на рис. 4б, с зависимостей $\rho_{LP}(t)$ для когерентного и некогерентного резонансного фотовозбуждения показывает, что осцилляции поляритонов между ловушками, реализующиеся при когерентном и некогерентном возбуждении, полностью синфазны, т.е. средняя величина $\Delta\phi(t = 0)$ при возбуждении некогерентными импульсами остается равной $\pi/2$. Величины же амплитуд осцилляций $\rho_{LP}(t)$ при некогерентном возбуждении, как и следовало ожидать, заметно уменьшаются: в рассчитанных зависимостях амплитуда осцилляций на 20% меньше, чем при когерентном возбуждении,

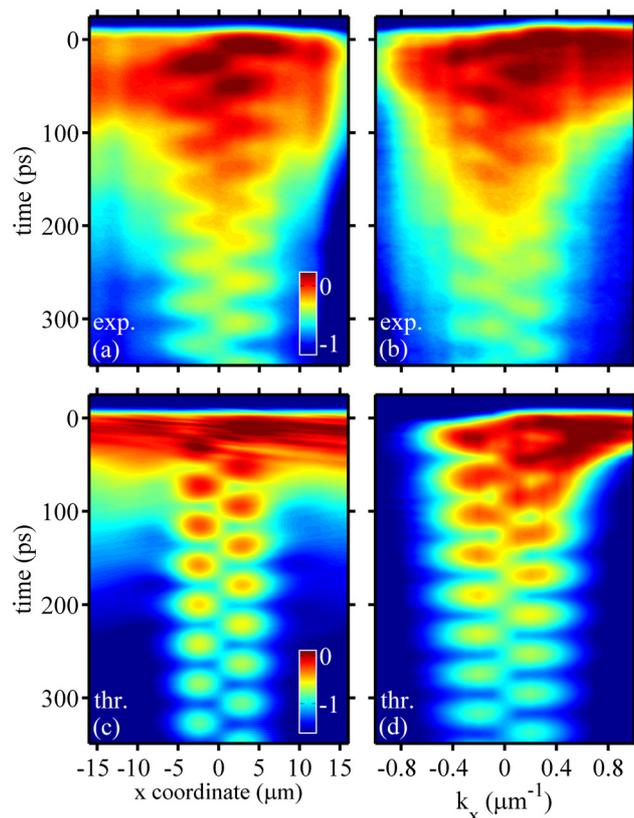


Рис. 7. (а, б) Измеренные и (с, д) усредненные по 50 импульсам рассчитанные зависимости $I_{LP}(x, t)$ (а, с) и $I_{LP}(k_x, t)$ (б, д) при возбуждении поляритонов некогерентными 10-пс импульсами под углом $\langle \theta_x \rangle = -4.5^\circ$ к нормали в пятне диаметром 50 мкм

а наблюдаемое в эксперименте уменьшение даже несколько больше — почти в 1.5 раза.

4. ВЫВОДЫ

В исследованиях пространственно-временной эволюции излучения экситонных поляритонов в туннельно-связанных симметричных ДПЛ с двумя локализованными состояниями в МР GaAs/AlAs при резонансной пикосекундной накачке найдено, что нарушение угловой симметрии накачивающих импульсных световых пучков, так же как и нарушение их пространственной симметрии, может быть использовано для возбуждения в ДПЛ макрозаполненного смешанного состояния двух локализованных мод, обеспечивающего осцилляции поляритонной плотности между ловушками. В отличие от случая возбуждения в ДПЛ только одной ловушки, когда реализуется макрозаполненное поляритонное состояние с нулевым $\langle k_x \rangle$ и крат-

ной π разностью фаз локализованных мод, при одинаковой плотности возбуждения двух ловушек и оптимальном угле θ_x генерируется состояние с разностью фаз $\Delta\phi = \pi/2$ и ненулевым $\langle k_x \rangle$. Иными словами, в первом случае реализуется макрозанное поляритонное состояние, максимально локализованное в прямом пространстве, а во втором — в обратном.

Показано, что пространственно-временная эволюция излучения экситонных поляритонов, резонансно возбуждаемых в туннельно-связанных симметричных ДПЛ когерентными и некогерентными импульсными световыми пучками, хорошо описывается системой уравнений Шредингера с учетом конечного времени жизни поляритонов и потенциала беспорядка в барьере.

Благодарности. Авторы выражают глубокую благодарность П. Саввидису за высококачественную МР-структуру, С. С. Гаврилову и С. Г. Тиходеву за плодотворные обсуждения.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 21-12-00368).

ЛИТЕРАТУРА

1. C. Weisbuch, M. Nishioka, A. Ishikawa, and Y. Arakawa, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 3314 (1992).
2. B. Deveaud, *The Physics of Semiconductor Microcavities*, Wiley-VCH, Weinheim (2007).
3. A. V. Kavokin, J. J. Baumberg, G. Malpuech, and F. P. Laussy, *Microcavities*, Oxford Univ. Press, Oxford (2007).
4. D. Sanvitto and V. Timofeev, *ExcitonPolaritons in Microcavities*, Springer-Verlag, Berlin (2012).
5. M. Wouters, *Phys. Rev. B* **77**, 121302(R) (2008).
6. D. Sarchi, I. Carusotto, M. Wouters, and V. Savona, *Phys. Rev.* **77**, 125324 (2008).
7. I. A. Shelykh, D. D. Solnyshkov, G. Pavlovic, and G. Malpuech, *Phys. Rev. B* **78**, 041302(R) (2008).
8. D. Read, Y. G. Rubo, and A. V. Kavokin, *Phys. Rev. B* **81**, 235315 (2010).
9. K. G. Lagoudakis, B. Pietka, M. Wouters, R. Andre, and B. Deveaud-Pledran, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 120403 (2010).
10. M. Abbarchi, A. Amo, V. G. Sala, D. D. Solnyshkov, H. Flayac, L. Ferrier, I. Sagnes, E. Galopin, A. Lemaitre, G. Malpuech, and L. Bloch, *Nature Phys.* **9**, 275 (2013).
11. M. E. Lebedev, D. A. Dolinina, Kuo-Bin Hong, Tien-Chang Lu, A. V. Kavokin, and A. P. Alodjants, *Sci. Rep.* **7**, 9515 (2017).
12. S. Abdalla, B. Zou, and Y. Zhang, *Opt. Express* **28**, 9136 (2020).
13. F. Bello and P. R. Eastham, *Phys. Rev. B* **95**, 245312 (2017).
14. A. Smerzi, S. Fantoni, S. Giovanazzi, and S. R. Shenoy, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 4950 (1997).
15. A. Barone and G. Paterno, *Physics and Applications of the Josephson Effect*, Wiley-Interscience, New York (1982).
16. A. A. Demenev, Ya. V. Grishina, S. I. Novikov, and V. D. Kulakovskii, *Phys. Rev. B* **94**, 195302 (2016).

ПЕРЕНОРМИРОВКА СПЕКТРА ВОЗБУЖДЕНИЙ И ЭФФЕКТ МИГДАЛА В ДВУМЕРНОЙ ЭЛЕКТРОННОЙ СИСТЕМЕ С СИЛЬНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

*И. В. Кукушкин**

*Институт физики твёрдого тела Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 11 марта 2022 г.,
после переработки 24 марта 2022 г.
Принята к публикации 24 марта 2022 г.

Из анализа спектров излучательной рекомбинации двумерных электронов с фотовозбужденными дырками, связанными на удаленных акцепторах, изучена зависимость энергии Ферми квазичастиц от электронной плотности и, таким образом, измерена зависимость перенормированной массы квазичастиц от концентрации двумерных электронов. Установлено, что по мере уменьшения электронной плотности (при увеличении параметра r_s до 4.5) эффективная масса плотностей состояний квазичастиц увеличивается на 35% по сравнению с циклотронной массой электронов. Показано, что в перпендикулярном магнитном поле концепция квазичастиц в двумерной ферми-жидкости сохраняется не только вблизи поверхности Ферми, но и глубоко под ней — вплоть до дна зоны размерного квантования, поскольку уширение возбуждений оказывается значительно меньше, чем их энергия. Установлено, что масса квазичастиц, а также их уширение заметно зависят от энергии квазичастиц, измеренной от поверхности Ферми вглубь вплоть до самого дна зоны размерного квантования. Обнаружен эффект Мигдала: в режиме сильного электрон-электронного взаимодействия при очень низкой температуре (25 мК) в функции распределения электронов появляются хвосты с обеих сторон от энергии Ферми (E_F), кроме того, при $E = E_F$ наблюдается резкий скачок в функции распределения электронов. Показано, что по мере уменьшения концентрации двумерных электронов вклад обнаруженных хвостов в функции распределения увеличивается, а амплитуда скачка Мигдала Z значительно уменьшается. Экспериментально исследована зависимость амплитуды скачка Мигдала от электронной плотности.

Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 95-летию Э. И. Раиба

DOI: 10.31857/S0044451022100066

EDN: ENNNWM

1. ВВЕДЕНИЕ

В 1956 г. для описания низкотемпературных свойств электронных систем с сильным взаимодействием Ландау [1] была предложена теория ферми-жидкости. Основная идея этой теории заключается в том, что все свойства такой сильно коррелированной системы при низких температурах могут быть описаны в терминах невзаимодействующих квазичастиц, число которых равно числу реальных электронов, функция распределения этих квазичастиц описывается фермиевской статистикой, а их

дисперсия может быть сильно модифицирована взаимодействием. Простейшим примером такой модификации является перенормировка массы, в результате которой масса квазичастиц может значительно отличаться от электронной массы, и, чем сильнее взаимодействие, тем сильнее эффекты перенормировки массы. Мерой силы межэлектронного взаимодействия является параметр

$$r_s = (\pi n_S a_B^2)^{-1/2},$$

где n_S — концентрация двумерных электронов, a_B — боровский радиус, который равен отношению кулоновской и фермиевской энергий (в случае одномерной системы). Модифицированная масса квазичастиц в первом приближении не зависит от температуры, магнитного поля и является параметром

* E-mail: kukush1@mail.ru

ром теории, зависящим лишь от потенциала межэлектронного взаимодействия. Другой вывод теории ферми-жидкости Ландау заключается в том, что энергия квазичастиц, которая отсчитывается от поверхности Ферми, помимо действительной части, характеризуется также еще мнимой частью (затуханием), которое минимально на поверхности Ферми и квадратично растет по мере удаления энергии от фермиевской энергии. Отсюда в теории Ландау возникает утверждение, что квазичастицы являются хорошо определенными только вблизи фермиевской поверхности и перестают быть таковыми при значительном отходе от поверхности Ферми. Для теории Ландау такое утверждение оказывается приемлемым, поскольку она претендует на описание низкотемпературных свойств электронной системы, т. е. когда тепловым образом рождается лишь небольшое количество возбуждений вблизи поверхности Ферми. Эти тепловые возбуждения представляют собой нейтральные пары квазиэлектронов и квазидырок, которые рождаются, соответственно, над и под поверхностью Ферми. Теория ферми-жидкости была построена [1–4] для трехмерных электронных систем, однако, как было показано позднее, основные выводы этой теории сохраняются и в случае двумерных электронных систем [5, 6], а также в магнитном поле [7].

Согласно теории, развитой Мигдалом в 1958 г. [8], электрон-электронное взаимодействие перестраивает функцию распределения Ферми-Дирака, выведенную для идеального газа без взаимодействия. В случае идеального газа при $T = 0$ функция распределения представляет собой ступеньку, в которой числа заполнения равны единице при энергиях, меньших фермиевской энергии, и нулю при $E > E_F$. Таким образом, в этом случае в функции распределения электронов при $E = E_F$ имеется скачок амплитудой $Z = 1$. Согласно теории Мигдала, межэлектронное взаимодействие приводит к тому, что даже при нулевой температуре в функции распределения электронов появляются хвосты с обеих сторон от энергии Ферми и скачок в функции распределения при E_F становится меньше 1, при этом, чем больше взаимодействие, тем меньше амплитуда скачка Z . Значение Z определяет относительный вес квазичастиц на фоне невзаимодействующих частиц. Несмотря на наличие довольно старой теории, описывающей эффект перераспределения функции распределения Ферми из-за межэлектронного взаимодействия, практически никаких экспериментов на эту тему не было сделано. Это

связано с тем, что подавляющее большинство экспериментальных методов способны изучать свойства возбуждений (электронов и дырок) лишь вблизи поверхности Ферми. Развитая нами уникальная методика, основанная на исследовании излучательной рекомбинации двумерных (2D) электронов под поверхностью Ферми с дырками, локализованными на удаленном слое акцепторов, впервые позволяет изучать свойства перенормированных возбуждений глубоко под поверхностью Ферми и дает возможность исследовать эффект Мигдала.

В трехмерном случае Абрикосовым и Халатниковым [9] для слабого взаимодействия было выведено соотношение, связывающее перенормированную массу в электронной ферми-жидкости (m_e^{FL}) и потенциал межэлектронного взаимодействия ($V(r)$):

$$m_e^{FL}/m_e = 1 + (ak_F)^2,$$

где k_F — фермиевский импульс, m_e — электронная масса, a — длина рассеяния, которая в борновском приближении дается выражением

$$a = \frac{m_e}{4\pi\hbar^2} \int V(r) d^3x.$$

В качестве экспериментальных методов изучения ферми-жидкостных эффектов в системе сильно взаимодействующих электронов обычно используются температурные исследования транспортных свойств, а именно, анализ амплитуды осцилляций Шубникова-де Гааза [10–14]. Такие исследования претендуют на оценку эффекта перенормировки электронной массы лишь вблизи от фермиевской энергии и не позволяют анализировать изменение дисперсии квазичастиц глубоко под поверхностью Ферми. Как будет показано ниже, из наших исследований следует, что массы возбуждений значительно различаются на поверхности Ферми и на дне 2D-подзоны, и оптический метод, который мы используем, позволяет измерять зависимость этой массы от энергии. Напротив, указанный выше транспортный метод оказывается чувствительным исключительно к массе возбуждений, отвечающей фермиевской энергии, и не позволяет исследовать эффекты непараболичности массы возбуждений. Из этих измерений можно извлекать интегральные параметры ферми-жидкости — параметры $F_0^{a,s}$ и $F_1^{a,s}$, которые отвечают характеристикам потенциала межэлектронного рассеяния [15]. Подробный обзор современного состояния экспериментальных исследований, проведенных для случая электронной ферми-жидкости в кремниевых полевых структурах, можно найти в работе [16]. Кро-

ме того, следует отметить, что в работе [17] методом биений осцилляций Шубникова–де Гааза было измерено соотношение между перенормированными эффективной массой и уширением уровней Ландау в двух подзонах с сильно различающимися заполнениями.

Вместе с тем в случае полупроводниковых квантовых ям существует оптический метод, позволяющий прямым образом измерять ферми-жидкостные свойства двумерной электронной системы с сильным взаимодействием [18]. Этот метод основан на измерении спектра излучательной рекомбинации двумерных электронов с фотовозбужденными дырками, связанными на удаленных акцепторах. Спектр излучения в этом случае прямо отражает функцию распределения, плотность состояний и затухание квазичастиц (квазидырок) в ферми-жидкости. Действительно, если акцепторный центр находится на достаточно большом расстоянии от двумерного канала (это требование легко удовлетворить [19]), то как в начальном, так и в конечном состоянии влиянием акцептора на свойства двумерных электронов можно пренебречь. В результате, согласно золотому правилу Ферми, спектр излучения будет представлять собой свертку плотности состояний квазичастиц (квазидырок в фермиевском море двумерных электронов) и фотовозбужденных дырок, связанных на акцепторе. Энергетическое распределение дырок, связанных на акцепторе, отвечает дельта-функции с энергией, равной энергии связи акцептора, поэтому спектр излучения будет представлять собой произведение плотности состояний и функции распределения квазичастиц, спектр которого перенормирован взаимодействием электронов. Процесс рекомбинации при этом выглядит просто как акт вырывания электрона (и оставления на его месте квазичастицы) из моря Ферми с последующим удалением электрона на бесконечность. Затухание такой квазичастицы (квазидырки) будет тем больше, чем глубже она находится от фермиевской поверхности, что связано с коротким временем рассеяния квазичастицы при ее «всплывании» на поверхность Ферми. При этом в перпендикулярном магнитном поле, как было показано в многочисленных экспериментах [18], спектр излучения двумерных электронов с фотовозбужденными дырками, связанными на удаленных акцепторах, расщепляется на уровни Ландау. Из этого расщепления непосредственно видно положение дна зоны размерного квантования и положение уровня Ферми, а также прямым образом измеряется циклотронное расщепление и ширина уровней Ландау в зависимости

от энергии квазичастиц, отсчитанной от поверхности Ферми. Таким образом, указанный экспериментальный метод позволяет измерять основные параметры ферми-жидкости двумерных электронов и их изменение при вариации электронной плотности.

В настоящей работе из спектров излучательной рекомбинации двумерных электронов с фотовозбужденными дырками, связанными на удаленных акцепторах, мы изучили зависимость энергии Ферми квазичастиц от электронной плотности и таким образом измерили зависимость перенормированной массы квазичастиц от концентрации двумерных электронов. Установлено, что по мере уменьшения электронной плотности (при увеличении параметра r_s до 4.5) эффективная масса плотности состояний квазичастиц увеличивается на 35 % по сравнению с «нормальной» электронной массой. При этом показано, что в двумерной электронной системе в магнитном поле энергетическое уширение уровней квазичастиц увеличивается по мере увеличения их энергии, отсчитанной от энергии Ферми, однако это уширение оказывается меньше, чем энергия квазичастиц вплоть до самого дна зоны размерного квантования. Обнаружен эффект Мигдала: в режиме сильного электрон-электронного взаимодействия при очень низкой температуре (25 мК) в функции распределения электронов появляются хвосты с обеих сторон от энергии Ферми (E_F), кроме того, при $E = E_F$ наблюдается резкий скачок в функции распределения электронов. Показано, что по мере уменьшения концентрации двумерных электронов вклад обнаруженных хвостов в функции распределения увеличивается, а амплитуда скачка Мигдала Z значительно уменьшается.

2. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЙ МЕТОД И СТРУКТУРЫ

В работе исследовались высококачественные квантовые ямы GaAs/AlGaAs шириной 500 Å, выращенные методом молекулярно-лучевой эпитаксии, в которых на расстоянии 400 Å от гетерограницы был встроены акцепторный монослой углерода с концентрацией около $0.5 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$. Во всех структурах толщина слоя нелегированного AlGaAs (спейсера) составляла 1000 Å, что обеспечивало высокую подвижность двумерных электронов ($\sim 10^7 \text{ см}^2/\text{В}\cdot\text{с}$ при концентрации электронов $\sim 10^{11} \text{ см}^{-2}$). Для вариации электронной плотности выращивались структуры с различным уровнем легирования и, кроме того, концентрацию электронов

можно было менять в некотором интервале с помощью метода фотообеднения [20]. В связи с тем, что масштаб и характер флуктуаций случайного потенциала может оказывать влияние на перенормировку параметров ферми-жидкости [21], следует указать, что во всех наших гетероструктурах рассеивающий потенциал был дальнедействующим, поскольку все исследованные структуры имели толстый спейсер (70–90 нм), который отделял 2D-канал от слоя ионизованных доноров. Во всех структурах можно было исследовать и сравнивать спектры и кинетику рекомбинации двумерных электронов со свободными дырками и с дырками, связанными на монослое акцепторов. Как было показано ранее [18], в случае рекомбинации двумерных электронов с фотовозбужденными дырками, связанными на удаленных акцепторах, спектр излучения прямо отражает плотность состояний двумерных электронов. При этом влияние акцепторного центра на спектр излучения можно уменьшить и сделать пренебрежимо малым, если обеспечить достаточное удаление акцепторного слоя от двумерного канала [19, 22]. Значительное пространственное разделение электронного канала и акцепторного слоя позволяет также увеличивать времена рекомбинации вплоть до нескольких микросекунд, что обеспечивает достижение действительно низких температур системы двумерных электронов (вплоть до 20 мК) даже в условиях фотовозбуждения [18]. В представленных измерениях все необходимые требования по пространственному разделению электронов и дырок были выполнены, и поэтому по спектрам излучения можно было непосредственно измерять энергетический спектр электронной ферми-жидкости. Так, в нулевом магнитном поле спектр излучения отражал постоянство плотности состояний двумерных электронов, а в перпендикулярном магнитном поле проявлялись хорошо определенные уровни Ландау, которые было можно характеризовать как спектральным расщеплением, так и уширением. При этом число уровней Ландау, наблюдавшихся под поверхностью Ферми, точно отвечало фактору заполнения электронной системы. Измерения проводились с помощью стандартной световодной методики в криостате растворения (базовая температура — 20 мК) с магнитным полем до 15 Тл. Для фотовозбуждения использовался перестраиваемый титан-сапфировый лазер, при этом характерная мощность на образце не превышала 50 нВт. Спектры излучения записывались с помощью двойного спектрометра U-1000 и CCD-камеры, охлаждаемой

жидким азотом. В работе также исследовалась зависимость циклотронной массы двумерных электронов от их концентрации, с тем чтобы сравнить ее с аналогичной зависимостью перенормированной массы квазичастиц. Циклотронная масса двумерных электронов определялась из анализа размерного микроволнового магнитоплазменного резонанса, измеренного методом оптического детектирования [23]. В рамках стандартного подхода можно было отдельно определять плазменный и циклотронный вклады в частоту гибридного магнитоплазменного резонанса, и из зависимости циклотронной частоты от магнитного поля измерялась электронная циклотронная масса. В качестве микроволнового генератора мы использовали Agilent, который позволял проводить измерения магнитоплазменного резонанса в диапазоне частот 1–40 ГГц. Измерение плазменной частоты позволяло нам также определять с высокой точностью концентрацию двумерных электронов [23].

3. ИЗМЕРЕНИЕ СРЕДНЕЙ МАССЫ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ

На рис. 1а показаны характерные спектры излучательной рекомбинации двумерных электронов с фотовозбужденными дырками, связанными на акцепторах, которые были измерены при концентрации электронов $3.05 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ в нулевом магнитном поле, а также в перпендикулярном магнитном поле $B = 0.9$ Тл. Характерной особенностью спектров люминесценции при $B = 0$ является то, что интенсивность излучения практически не зависит от энергии в широком интервале частот, а ширина линии излучения оказывается равной энергии Ферми электронов. При этом со стороны высоких энергий линия излучения характеризуется очень резким порогом, что соответствует низкой температуре электронной системы (на рис. 1а, $T = 0.4$ К). Такой спектр излучения отражает постоянство плотности состояний двумерных электронов в нулевом магнитном поле, а также фермиевскую функцию распределения. В простейшей модели, согласно золотому правилу Ферми, спектр рекомбинации двумерных электронов с удаленными дырками, связанными на акцепторах, при $T = 0$ должен представлять собой Θ -функцию с шириной, равной энергии Ферми, и с резкими порогами как со стороны высоких, так и со стороны низких энергий. Как видно из рис. 1а, спектр, измеренный в нулевом магнитном поле при низких температурах, имеет резкий

порог лишь со стороны высоких энергий, а со стороны низких энергий наблюдается уширение, которое возникает из-за значительного затухания квазичастиц (квазидырок под поверхностью Ферми). Наблюдающееся уширение низкоэнергетической части спектра не позволяет надежно и точно определить положение дна зоны размерного квантования и тем самым усложняет задачу точного измерения энергии Ферми двумерных электронов при известной электронной плотности. Для решения этой задачи необходимо исследовать картину уровней Ландау, которая наблюдается в перпендикулярном магнитном поле. На рис. 1*b* показан спектр люминесценции, измеренный в перпендикулярном магнитном поле $B = 0.9$ Тл, отвечающем фактору заполнения $\nu = 14$ (при электронной плотности $3.05 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$). Как видно из этого рисунка, в полном соответствии с фактором заполнения $\nu = 14$, в спектре излучения наблюдается семь линий (каждый уровень Ландау двукратно вырожден по спину), каждая из которых отвечает рекомбинации электронов из разных уровней Ландау. Расщепление между линиями равно циклотронной энергии. Детальный анализ спектров показывает, что а) ширины уровней Ландау сильно отличаются друг от друга, и при этом минимальное уширение наблюдается вблизи энергии Ферми, а максимальное уширение — на дне зоны размерного квантования; б) энергетическое расщепление между уровнями Ландау не является одинаковым. Первая особенность в точности отвечает предсказанию теории ферми-жидкости Ландау, согласно которому уширение энергетических уровней квазичастиц минимально на поверхности Ферми и значительно возрастает по мере удаления от фермиевской энергии. Вторая обнаруженная особенность означает, что масса квазичастиц не является постоянной величиной, а вместо этого наблюдается некоторая непараболичность спектра. Обнаруженную непараболичность спектра мы подробно обсудим ниже, а пока (в первом приближении) нас будет интересовать средняя ферми-жидкостная эффективная масса плотности состояний двумерных электронов $\langle m_{ds}^{FL} \rangle$ и ее зависимость от электронной плотности. Для определения величины $\langle m_{ds}^{FL} \rangle$ требуется измерить энергию Ферми (E_F) и тогда

$$\langle m_{ds}^{FL} \rangle = \pi \hbar^2 n_S / E_F$$

(где \hbar — постоянная Планка). Для точного измерения энергетических положений дна размерного квантования и энергии Ферми в спектре люминесценции требуется провести анализ веера уровней Ландау (зависимость энергии уровней от магнит-

ного поля), который представлен на рис. 1*b*. Низкоэнергетический фокус этого веера, куда сходятся все уровни Ландау, позволяет с большой точностью определить положение дна зоны размерного квантования. Для определения спектральной позиции энергии Ферми можно также воспользоваться анализом энергетических положений уровней Ландау, если иметь в виду, что при целочисленном заполнении (при $\nu = 4, 6, 8, 10, 12, 14, 16, 18, \dots$) химический потенциал электронной системы лежит между уровнями Ландау и потому верхний заполненный уровень отстоит вниз по энергии от уровня Ферми (химического потенциала) на половину циклотронной энергии. Поэтому если проводить линейную зависимость от магнитного поля для верхнего заполненного уровня Ландау при разных целочисленных факторах заполнения, то эта зависимость в пределе нулевого магнитного поля будет указывать на спектральную позицию, отвечающую фермиевской энергии двумерных электронов. Такой анализ уровней Ландау представлен на рис. 1*b*, из которого видно, что величина энергии Ферми может быть измерена с большой точностью, как спектральное расщепление между фокусами вееров уровней Ландау. Для концентрации двумерных электронов $3.05 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ мы определили, что $E_F = 10.40$ мэВ, и, следовательно, эффективная масса плотности состояний $\langle m_{ds}^{FL} \rangle = (0.0705 \pm 0.0002) m_0$.

Аналогичная процедура измерения энергии Ферми двумерных электронов и эффективной массы плотности состояний была проделана для различных концентраций электронов в диапазоне от $0.17 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ до $5.4 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$. На рис. 2 представлены спектры излучения, измеренные для концентрации двумерных электронов $0.22 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ в нулевом магнитном поле, а также в перпендикулярном поле 0.15 Тл (фактор заполнения равен 6). Следует отметить, что в этом случае спектры были измерены при значительно более низкой температуре $T = 0.05$ К. При столь низких концентрациях двумерных электронов основные свойства спектра излучения сохраняются: отчетливо наблюдаются как постоянство плотности состояний в нулевом магнитном поле, так и веер уровней Ландау в перпендикулярном поле, что позволяет провести точные измерения спектральных позиций дна зоны размерного квантования и фермиевской энергии. Для концентрации двумерных электронов $0.22 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ мы определили, что $E_F = 0.59$ мэВ, и, следовательно, эффективная масса плотности состояний оказалась равной $\langle m_{ds}^{FL} \rangle = (0.0890 \pm 0.0005) m_0$, что значительно

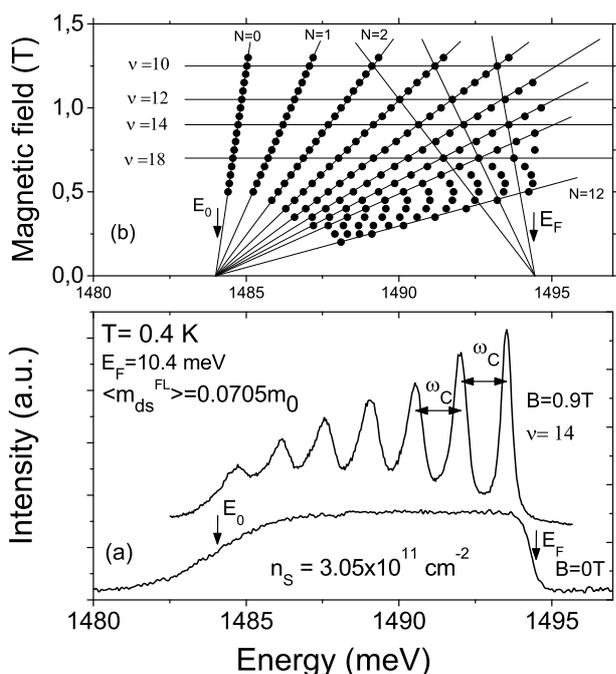


Рис. 1. а) Спектры излучательной рекомбинации двумерных электронов с фотовозбужденными дырками, связанными на акцепторах, измеренные в магнитном поле $B = 0$ и 0.9 Тл ($\nu = 14$). б) Веер уровней Ландау, из которого определяются спектральные положения дна размерного квантования и энергии Ферми. Концентрация электронов в образце равна $3.05 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$. $T = 0.4$ К

превосходит стандартную величину циклотронной массы электронов в GaAs $m_e = 0.067m_0$. На рис. 3 представлена измеренная зависимость эффективной массы плотности состояний в двумерной электронной ферми-жидкости от плотности электронов. Видно, что по мере увеличения параметра r_S от 1 до 4.5 наблюдается значительное (более 35%) увеличение эффективной массы плотности состояний электронов. Отметим, что при малых значениях r_S наблюдается некоторое уменьшение массы $\langle m_{ds}^{FL} \rangle$ с ростом r_S , что также соответствует теории Ландау. Для сравнения мы исследовали, как меняется в этом же интервале плотностей циклотронная масса двумерных электронов. Эта зависимость также представлена на рис. 3. Видно, что измеренные зависимости циклотронной массы и ферми-жидкостной массы от электронной плотности имеют прямо противоположный характер в пределе малых концентраций: циклотронная масса уменьшается, а масса плотности состояний в электронной ферми-жидкости значительно увеличивается. Следует отметить, что обнаруженный рост циклотронной массы двумерных электронов при увеличении их

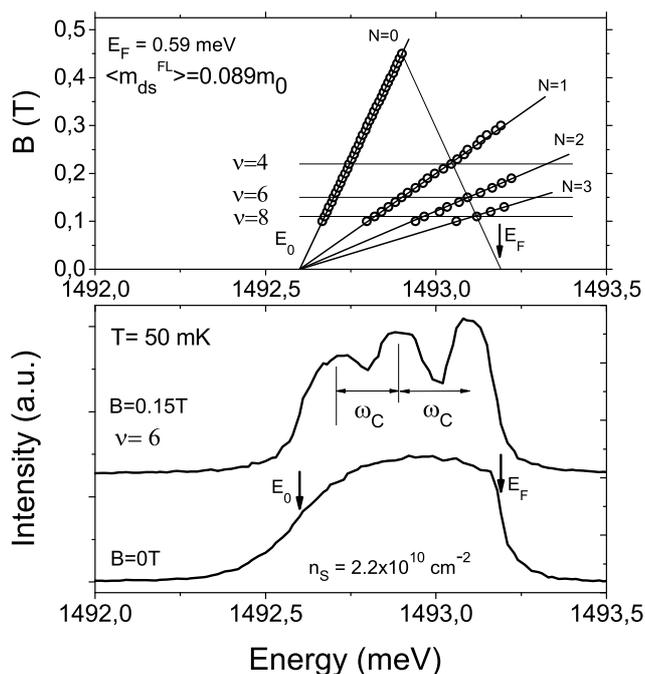


Рис. 2. а) Спектры излучательной рекомбинации двумерных электронов с фотовозбужденными дырками, связанными на акцепторах, измеренные в магнитном поле $B = 0$ и 0.15 Тл ($\nu = 6$). б) Веер уровней Ландау, из которого определяются спектральные положения дна размерного квантования и энергии Ферми. Концентрация электронов в образце равна $0.22 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$. $T = 0.05$ К

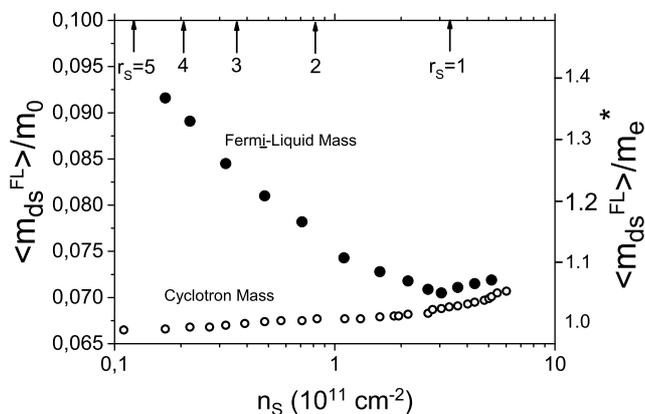


Рис. 3. Зависимость перенормированной эффективной массы плотности состояний в ферми-жидкости двумерных электронов (черные символы) и циклотронной массы (светлые символы) от концентрации

плотности связан с непараболичностью электронного спектра в GaAs и хорошо согласуется с более ранними исследованиями непараболичности зонной массы [24]. Следует отметить, что зависимость ферми-жидкостной массы от параметра r_S измеря-

лась ранее из анализа температурной зависимости амплитуды осцилляций Шубникова–де Гааза [25] и результаты, полученные в этих исследованиях, очень близки к результатам наших измерений.

4. ИЗМЕНЕНИЕ ШИРИНЫ УРОВНЕЙ ЛАНДАУ И РАСЩЕПЛЕНИЯ МЕЖДУ НИМИ В ГЛУБИНЕ ПОД ПОВЕРХНОСТЬЮ ФЕРМИ

В предыдущих разделах статьи мы исследовали зависимость средних значений перенормированной массы плотности состояний от электронной плотности. Для этого при разных концентрациях электронов измерялась энергия Ферми и в предположении, что масса квазичастиц не зависит от их энергии, определялась средняя масса плотности состояний. Однако, как будет видно из дальнейших исследований, этот подход является не вполне правильным и в действительности наблюдается значительная зависимость массы квазичастиц от их энергии, измеренной от поверхности Ферми вглубь вплоть до самого дна зоны размерного квантования. Для изучения непараболичности дисперсии квазичастиц под поверхностью Ферми мы исследовали магнитополевую зависимость расщепления между уровнями Ландау при различных заданных (приблизительно) энергиях квазичастиц, отсчитанных вниз от энергии Ферми. Обнаруженный эффект непараболичности дисперсии возбуждений был измерен при разных концентрациях электронной системы. Кроме того, было обнаружено, что ширина уровней Ландау заметно зависела от энергии квазичастиц: уширение было минимальным вблизи поверхности Ферми и значительно увеличивалось (почти в 2 раза) в глубине на дне зоны размерного квантования.

На рис. 4 показаны спектры излучательной рекомбинации двумерных электронов с дырками, локализованными на акцепторах, измеренные при концентрации двумерных электронов $1.6 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$. Представлены спектры, измеренные в нулевом магнитном поле, а также в магнитном поле $B = 0.66 \text{ Тл}$, когда фактор заполнения уровней Ландау равен 10. При этом спектры в магнитном поле измерялись для одной циркулярной поляризации света (сигма-минус). Из этого рисунка видно, что при $\nu = 10$ в спектре излучения наблюдаются пять уровней Ландау (каждый из которых дважды вырожден по спину), причем ширина уровней Ландау не является постоянной по спектру, а значительно меняется от минимальной величины вблизи поверхности Ферми до максимальной величины на дне зоны размерного

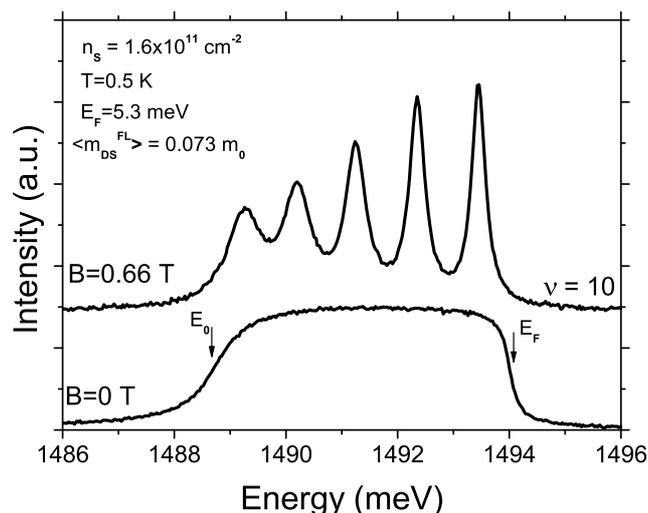


Рис. 4. Спектры излучательной рекомбинации двумерных электронов с дырками, локализованными на акцепторах, измеренные в нулевом магнитном поле и при $B = 0.66 \text{ Тл}$ для концентрации двумерных электронов $1.6 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$

квантования. Для подробного анализа зависимости ширины уровней Ландау, а также энергии расщепления между ними от энергии квазичастиц мы аппроксимировали измеренный спектр суммой уровней, описывающихся законом Лоренца и имеющих одинаковую интегральную интенсивность. При этом подгоночными параметрами для каждого из уровней были а) его положение в спектре и б) ширина.

Сопоставление экспериментально измеренного спектра с оптимально аппроксимированным спектром представлено на рис. 5. На этом рисунке показаны результаты такой процедуры разделения контуров линий, из которых следует, что ширины уровней Ландау изменяются от 0.3 мэВ (верхний уровень) до 0.75 мэВ (нижний уровень), а расщепление между уровнями Ландау в магнитном поле $B = 0.66 \text{ Тл}$ изменяется от 1.15 мэВ (вблизи поверхности Ферми) до 0.94 мэВ (вблизи дна зоны размерного квантования). На рис. 6 представлены зависимости ширины уровней Ландау от энергии возбуждений, измеренной от поверхности Ферми. Следует отметить, что эти измерения ширины уровней были сделаны в разных магнитных полях и для различных номеров уровней Ландау, однако измеренная зависимость ширины уровней от энергии возбуждения оказалась универсальной и близка к квадратичной. Подобные зависимости уширения уровней Ландау от энергии возбуждений были измерены для двух концентраций двумерных электронов $1.6 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ и $3.05 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ и они обе показаны на рис. 6. Видно, что в обоих

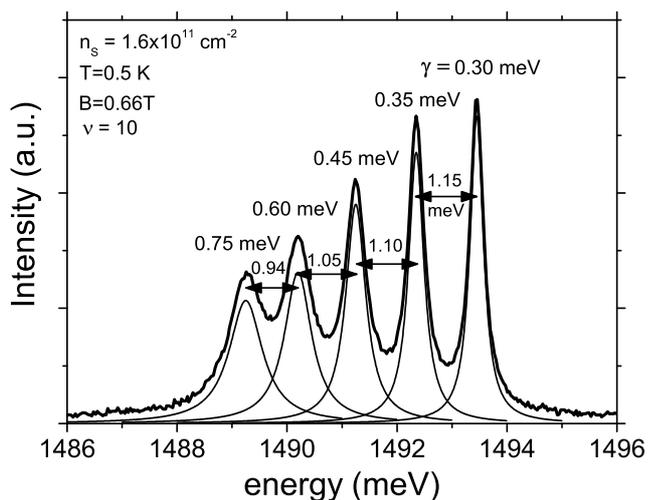


Рис. 5. Разделение контуров линий в спектре, позволяющее измерять расщепления линий и их ширину

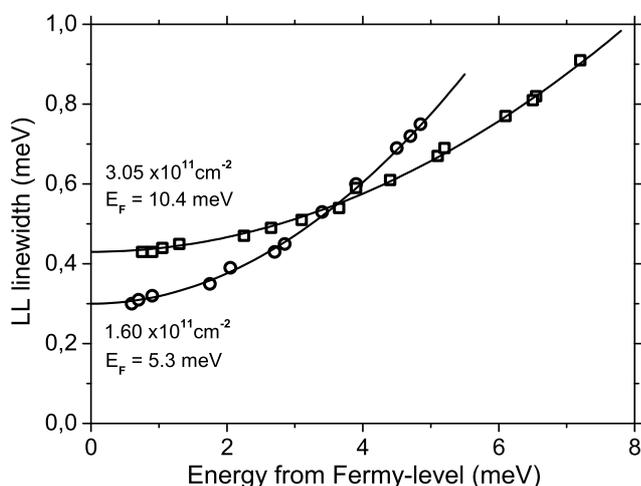


Рис. 6. Зависимости ширины уровней Ландау от энергии возбуждений, измеренные для двух концентраций двумерных электронов $1.6 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ и $3.05 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$

случаях наблюдается плавное увеличение (близкое к квадратичному) ширины уровней с ростом энергии возбуждений, если отсчитывать ее от энергии Ферми. При этом для меньших концентраций наблюдается значительно более быстрый рост уширения уровней Ландау от энергии.

Обнаруженную зависимость уширения уровней Ландау от энергии возбуждений естественно связать с механизмом, предложенным Ландау в теории ферми-жидкости. Согласно этому механизму возбуждение (квазидырка), рожденное в глубине под поверхностью Ферми, будет всплывать на поверхность Ферми и при этом, чем глубже родилось возбуждение, тем у него больше возможностей для рас-

сеяния, и поэтому всплытие из большей глубины будет происходить значительно быстрее, а вблизи поверхности Ферми процессы всплытия тормозятся и требуют значительно большего времени. Малое время рассеяния (и энергетической релаксации) глубоко под поверхностью Ферми означает значительное уширение уровней, в то время как вблизи поверхности Ферми уширение уровней будет практически отсутствовать из-за торможения процессов релаксации. Обнаруженная квадратичная зависимость ширины уровней от энергии также согласуется с выводами теории. Значительно более слабый рост уширения уровней Ландау в зависимости от энергии, наблюдающийся для больших концентраций (см. рис. 6), скорее всего, связан с тем, что при больших плотностях электронной системы ферми-жидкостные эффекты становятся менее важными и это проявляется в подавлении эффектов перенормировки массы возбуждений, а также в уширении уровней энергии.

Из рис. 5 видно также, что кроме зависимости ширины уровней Ландау от энергии имеется заметное изменение расщепления между уровнями Ландау при погружении вглубь от поверхности Ферми. Например, при $B = 0.66 \text{ Тл}$ расщепление между уровнями, расположенными вблизи поверхности Ферми, оказывается равным 1.15 мэВ , в то время как расщепление между наиболее глубокими уровнями значительно меньше и составляет величину 0.94 мэВ . Уменьшение циклотронного расщепления в глубине под поверхностью Ферми означает, что масса возбуждений не является постоянной и зависит от энергии возбуждения. Для изучения этого эффекта непараболичности дисперсии квазичастиц под поверхностью Ферми мы исследовали магнитопольную зависимость расщепления между уровнями Ландау при различных заданных (приблизительно) энергиях квазичастиц, отсчитанных вниз от энергии Ферми.

На рис. 7 представлены зависимости энергии расщепления между уровнями Ландау от магнитного поля, измеренные для двух значений энергий возбуждений 1.5 мэВ и 4.5 мэВ при плотности электронной системы $1.6 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$. Из этого рисунка видно, что если зафиксировать с некоторой точностью энергию возбуждения и измерять зависимость расщепления между уровнями Ландау от магнитного поля, то эта зависимость оказывается близка к линейной, что и позволяет измерить массу возбуждения (m_{LL}^{FL}) при заданной энергии. Кроме того, из рис. 7 видно, что наклон магнитопольных зависимостей, измеренных при различных значениях

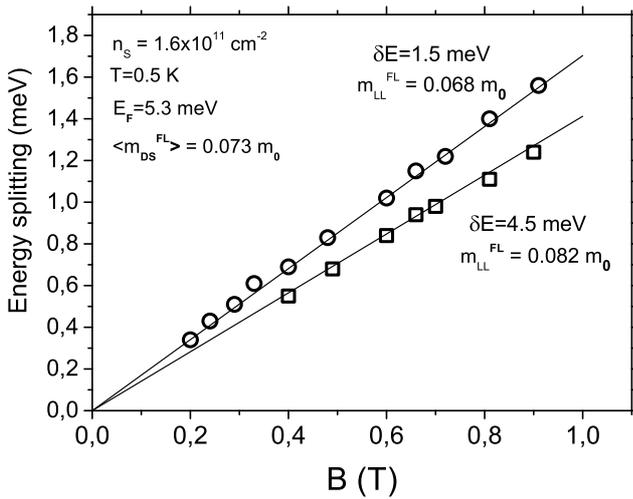


Рис. 7. Зависимости энергии расщепления между уровнями Ландау от магнитного поля, измеренные для двух значений энергий возбуждений 1.5 мэВ и 4.5 мэВ при плотности электронной системы $1.6 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$

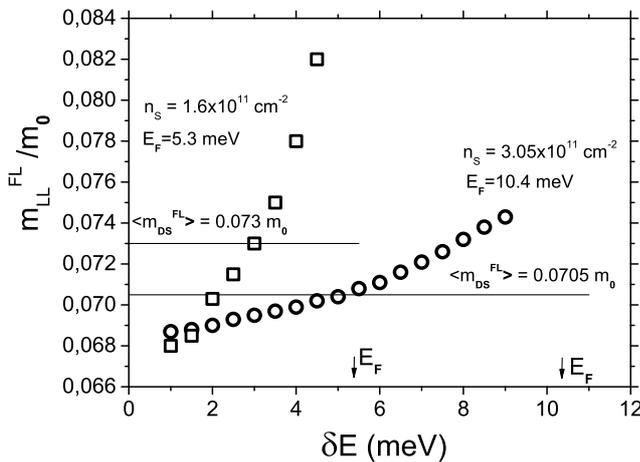


Рис. 8. Зависимости перенормированной массы возбуждений от их энергии, измеренные для двух значений электронной плотности $1.6 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ и $3.05 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$. Показаны также значения средних масс плотности состояний, измеренные для этих концентраций

энергии, оказывается заметно разным, а следовательно, заметно различаются и массы возбуждений. При энергии возбуждений 4.5 мэВ масса возбуждений $\langle m_{LL}^{FL} \rangle$, измеренная из расщепления между уровнями Ландау, оказывается около $0.082m_0$, что значительно больше, чем значение массы $0.068m_0$, измеренное для энергии 1.5 мэВ. Зависимости перенормированной массы возбуждений $\langle m_{LL}^{FL} \rangle$ от их энергии представлены на рис. 8 для двух значений электронной плотности $1.6 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ и $3.05 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$. На этом рисунке также показаны значения средних

масс плотности состояний $\langle m_{ds}^{FL} \rangle$, измеренные для этих концентраций. Из рис. 8 видно, что эффект непараболичности массы значительно сильнее в случае малой концентрации (при $1.6 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ он достигает 25 %, в то время как при $3.05 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ этот эффект составляет лишь 9 %).

5. ЭФФЕКТ МИГДАЛА

Для исследования эффекта Мигдала мы изучали, как изменяется спектр излучения двумерных электронов в пределе очень низких температур (до 20 мК). На рис. 9 представлен такой спектр излучения, измеренный для концентрации электронов

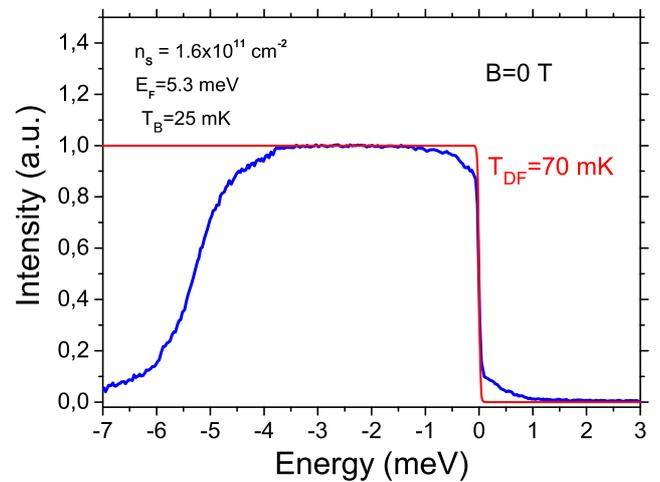


Рис. 9. Спектр излучения, измеренный для концентрации электронов $1.6 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ и при температуре бани, равной 25 мК. Показана также аппроксимация энергетического распределения интенсивности излучения вблизи уровня Ферми функцией Ферми–Дирака, отвечающей температуре 70 мК, которая лучшим образом описывает резкий скачок интенсивности на E_F

$1.6 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ и при температуре бани 25 мК. Сверхнизкая температура электронной системы в первую очередь проявлялась в аномально резком скачке интенсивности излучения, который наблюдался вблизи энергии Ферми. Ясно, что этот наблюдающийся скачок прямым образом связан с резким скачком фермиевской функции распределения электронов. Аппроксимация энергетического распределения интенсивности излучения вблизи уровня Ферми функцией Ферми–Дирака показана также на рис. 9. Оказалось, что резкость наблюдаемого скачка интенсивности излучения отвечает не 25 мК, а близка к 70 мК. Это отличие, несомненно, связано с небольшим перегревом электронной системы в условиях

неравновесного фотовозбуждения. Мы проверили экспериментально, что скачок энергетического распределения интенсивности излучения вблизи уровня Ферми тем резче, чем ниже температура бани и, кроме того, в этих измерениях было установлено, что перегрев электронной системы составлял 40–50 мК во всем диапазоне исследованных температур (от 20 до 150 мК). Дополнительно было установлено, что при изменении электронной плотности от $1.6 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ до $0.22 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ резкий скачок энергетического распределения интенсивности излучения всегда наблюдался вблизи уровня Ферми и перегрев электронной системы по сравнению с температурой бани был около 40–60 мК и слабо зависел от концентрации 2D-электронов. Главной чертой спектров излучения, измеренных при сверхнизких температурах (помимо уже отмеченного резкого скачка интенсивности излучения), является ярко выраженное отклонение от фермиевского распределения и появление энергетических хвостов с обеих сторон от энергии Ферми. Именно такой эффект и был предсказан Мигдалом в 1957 г. [8]. Следует отметить, что в то время доминировало довольно естественное предположение, что в электронной системе с взаимодействием размытие функции распределения при импульсе, равном импульсу Ферми, перестает зависеть от температуры в пределе очень низких температур и определяется энергией взаимодействия. В отличие от этого ожидания, теория Мигдала предсказывала, что в пределе очень низких температур, несмотря на эффекты взаимодействия, резкий скачок в функции распределения при E_F сохраняется, но уменьшается по амплитуде Z , причем величина Z тем меньше, чем сильнее взаимодействие между электронами. Кроме того, согласно теории Мигдала, следствием межэлектронного взаимодействия становится появление хвостов в функции распределения электронов с обеих сторон от энергии Ферми, и площадь состояний под этими хвостами увеличивается с ростом эффектов взаимодействия. Как следует из рис. 9, именно такое поведение функции распределения, аналогичное предсказанию Мигдала, и наблюдается в эксперименте. Для количественной проверки теории Мигдала мы исследовали, как изменяется функция распределения при уменьшении электронной плотности, когда эффекты взаимодействия относительно возрастают.

На рис. 10 представлено сравнение спектров излучения, измеренных при плотностях 2D-электронов $1.6 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ ($r_s = 1.4$) и $0.22 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ ($r_s = 3.8$). Для удобства сравнения мы представили на этом рисунке спектры, в которых энергия из-

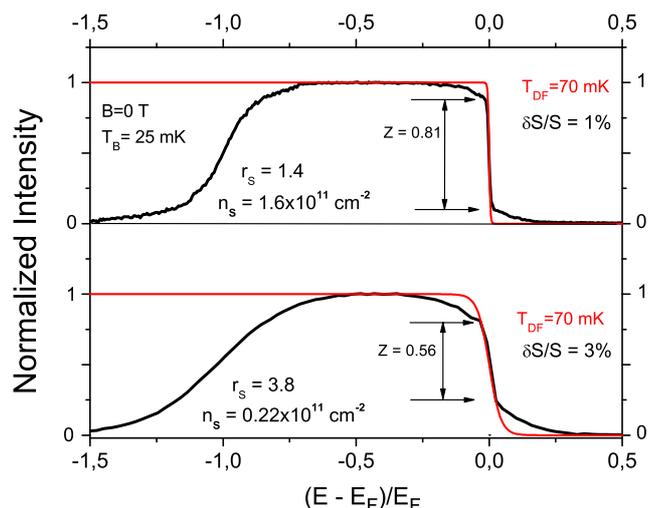


Рис. 10. Сравнение спектров излучения, измеренных при плотностях 2D-электронов $1.6 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ ($r_s = 1.4$) и $0.22 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ ($r_s = 3.8$). Для удобства сравнения показаны спектры, в которых энергия излучения отсчитана от энергии Ферми и нормирована на фермиевскую энергию

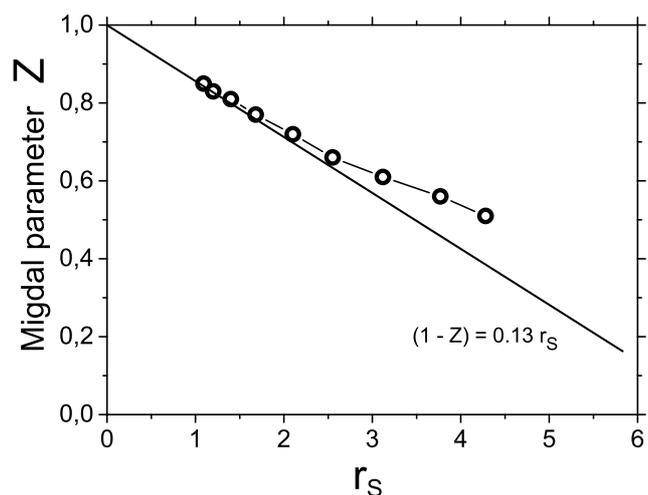


Рис. 11. Зависимость амплитуды скачка Мигдала Z от безразмерного параметра r_s , характеризующего концентрацию двумерных электронов

лучения отсчитана от энергии Ферми и нормирована на фермиевскую энергию. Из рис. 10 видно, что в случае большей плотности доля хвостов в функции распределения ($\delta S/S$), возникающих из-за эффекта Мигдала, составляла лишь 1%, а в случае меньшей плотности эта доля увеличилась в 3 раза и составила 3%. Кроме того, из рисунка видно, что амплитуда скачка Мигдала Z в первом случае составляла 0.81, а при меньшей концентрации значение Z значительно уменьшилось до величины

$Z = 0.56$. Обнаруженная зависимость спектров излучения 2D-электронов от электронной плотности в пределе сверхнизких температур полностью соответствует эффекту Мигдала. На рис. 11 представлена измеренная зависимость амплитуды скачка Мигдала Z от концентрации двумерных электронов, которая представлена в виде зависимости Z от безразмерного параметра r_s . Видно, что при малых r_s наблюдается практически линейная зависимость Z от r_s , а при увеличении r_s эта зависимость естественно становится более медленной.

Таким образом, в работе исследованы ферми-жидкостные эффекты перенормировки эффективной массы квазичастиц в системе двумерных электронов с сильным взаимодействием в зависимости от электронной плотности. Установлено, что по мере уменьшения электронной плотности (при увеличении параметра r_s до 4.5) эффективная масса плотности состояний квазичастиц увеличивается на 35% по сравнению с циклотронной массой электронов. Показано, что в перпендикулярном магнитном поле концепция квазичастиц в двумерной ферми-жидкости сохраняется не только вблизи поверхности Ферми, но и глубоко под ней — вплоть до дна зоны размерного квантования. Установлено, что масса квазичастиц, а также уширение их энергетических уровней заметно зависят от энергии квазичастиц, измеренной от поверхности Ферми вглубь вплоть до самого дна зоны размерного квантования. Обнаружен эффект Мигдала: в режиме сильного электрон-электронного взаимодействия при очень низкой температуре (25 мК) в функции распределения электронов появляются хвосты с обеих сторон от энергии Ферми E_F , кроме того, при $E = E_F$ наблюдается резкий скачок в функции распределения электронов. Показано, что по мере уменьшения концентрации двумерных электронов вклад обнаруженных хвостов в функции распределения увеличивается, а амплитуда скачка Мигдала значительно уменьшается. Экспериментально исследована зависимость амплитуды скачка Мигдала Z от электронной плотности.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 20-02-00177) и Российского научного фонда (грант 22-12-00257).

ЛИТЕРАТУРА

1. Л. Д. Ландау, ЖЭТФ **30**, 1058 (1956).
2. Л. Д. Ландау, ЖЭТФ **32**, 59 (1957).

3. В. П. Силин, ЖЭТФ **34**, 781 (1958).
4. P. Nozieres and J. M. Luttinger, Phys. Rev. **127**, 1423 (1962).
5. R. Freedman, Phys. Rev. B **18**, 2482 (1978).
6. C. Chamon, E. R. Mucciolo, and A. H. Castro Neto, Phys. Rev. B **64**, 245115 (2001).
7. Ю. А. Бычков, А. В. Колесников, Письма в ЖЭТФ **58**, 349 (1993).
8. А. Б. Мигдал, ЖЭТФ **32**, 399 (1957).
9. А. А. Абрикосов, И. М. Халатников, ЖЭТФ **33**, 1154 (1957).
10. P. T. Coleridge, M. Hayne, P. Zawadzki, and A. S. Sachrajda, Surf. Sci. **361/362**, 560 (1996).
11. V. M. Pudalov, M. E. Gershenson, H. Kojima, N. Butch, E. M. Dizhur, G. Brunthaler, A. Prinz, and G. Bauer, Phys. Rev. Lett. **88**, 196404 (2002).
12. A. A. Shashkin, S. V. Kravchenko, V. T. Dolgoplov, and T. M. Klapwijk, Phys. Rev. B **66**, 073303 (2002).
13. A. A. Shashkin, M. Rahimi, S. Anissimova, S. V. Kravchenko, V. T. Dolgoplov, and T. M. Klapwijk, Phys. Rev. Lett. **91**, 046403 (2003).
14. Y. W. Tan, J. Zhu, H. L. Stormer, L. N. Pfeiffer, K. W. Baldwin, and K. W. West, Phys. Rev. Lett. **94**, 016405 (2005).
15. Е. М. Лифшиц, Л. П. Питаевский, *Статистическая физика*, Москва, Наука (1978).
16. В. Т. Долгополов, Письма в ЖЭТФ **101**, 300 (2015).
17. V. M. Pudalov, M. E. Gershenson, and H. Kojima, Phys. Rev. B **90**, 075147 (2014).
18. I. V. Kukushkin and V. B. Timofeev, Adv. Phys. **45**, 147 (1996).
19. I. V. Kukushkin, R. J. Haug, K. von Klitzing, K. Eberl, and K. Totemeyer, Phys. Rev. B **50**, 11259 (1994).
20. I. V. Kukushkin, K. von Klitzing, K. Ploog, V. E. Kirpichev, and B. N. Shepel, Phys. Rev. B **40**, 4179 (1989).
21. W. R. Clarke, C. E. Yasin, A. R. Hamilton, A. P. Micolic, M. Y. Simmons, K. Muraki, Y. Hiroshima, M. Pepper, and D. A. Ritchie, Nature Phys. **4**, 55 (2008).

22. В. М. Апальков, Э. И. Рашба, Письма в ЖЭТФ **53**, 420 (1991).
23. I. V. Kukushkin, J. H. Smet, S. A. Mikhailov, D. V. Kulakovskii, K. von Klitzing, and W. Wegscheider, Phys. Rev. Lett. **90**, 156801 (2003).
24. M. A. Hopkins, R. J. Nicholas, M. A. Brummel, J. J. Harris, and C. T. Foxon, Phys. Rev. B **36**, 4789 (1987).
25. Y.-W. Tan, J. Zhu, H. L. Stormer, L. N. Pfeiffer, K. W. Baldwin, and K. W. West, Phys. Rev. Lett. **94**, 016405 (2005).

МАГНИТОЭКСИТОННЫЙ КОНДЕНСАТ В ХОЛЛОВСКОМ ДИЭЛЕКТРИКЕ

*А. В. Горбунов**, *В. Б. Тимофеев*

*Институт физики твердого тела им. Ю. А. Осипьяна Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия*

Поступила в редакцию 27 мая 2022 г.,
после переработки 27 мая 2022 г.
Принята к публикации 30 мая 2022 г.

Представлен обзор экспериментальных исследований свойств недавно обнаруженного нового когерентного коллективного состояния — магнитоэкситонного конденсата. Конденсация происходит при температурах ниже 1 К в фермиевской системе, квантово-холловском изоляторе (фактор заполнения $\nu = 2$), в результате образования плотного ансамбля долгоживущих триплетных спиновых циклотронных магнитоэкситонов, композитных бозонов. Конденсированная фаза взаимодействует когерентно с внешним электромагнитным полем, демонстрирует способность к быстрому недиффузионному распространению на макроскопические расстояния и высокую пространственную когерентность.

Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 95-летию Э. И. Раиба

DOI: 10.31857/S0044451022100078

EDN: ENOATL

1. ВВЕДЕНИЕ

В квантово-холловской двумерной электронной системе (2D ЭС) магнитоэкситоны — это возбуждения в зоне проводимости, сформированные электронной вакансией на «нижнем» уровне Ландау, т. е. ниже уровня Ферми (в дальнейшем для краткости — ферми-дырка) и электроном в некотором другом состоянии (орбитальном или спиновом) с большей энергией. Квантово-холловский изолятор формируется при полном заполнении электронами уровня/уровней Ландау: фактор заполнения $\nu = 2, 4, \dots$. В квантово-холловском изоляторе с $\nu = 2$ электронными возбуждениями являются магнитоэкситоны, образованные возбужденным электроном на незаполненном первом уровне Ландау и ферми-дыркой на полностью заполненном нулевом уровне Ландау (рис. 1а). В спектре возбуждений квантово-холловского изолятора имеются два типа циклотронных магнитоэкситонов: спин-синглетный магнитоэкситон с полным спином $S = 0$ и спин-триплетный магнитоэкситон с полным спином $S = 1$. Спин-син-

глетный магнитоэкситон есть не что иное, как магнитоплазмон — бесспиновое возбуждение, у которого, согласно теореме Кона, энергия при нулевом волновом векторе равна одночастичной циклотронной энергии [1, 2]. Компоненты триплетного спинового экситона, для которых проекция спина на направление магнитного поля $S_Z = -1, 0, +1$, энергетически отделены друг от друга зеемановской щелью, причем при нулевом волновом векторе, $q = 0$, и даже при других актуальных значениях, $q \lesssim 1/l_B$ ($l_B = \sqrt{ch/eB}$ — магнитная длина), весь триплет в гетероструктурах GaAs/Al_xGa_{1-x}As оказывается ниже незаполненного уровня Ландау, т. е. имеет энергию ниже циклотронной щели на величину некоторой дополнительной «энергии связи», определяемой кулоновскими корреляциями в 2D ЭС [3–5]. Отрицательный «кулоновский сдвиг» позволяет считать компоненту такого спин-циклотронного экситона (СЦЭ), соответствующую значению $S_Z = +1$, низшим по энергии¹⁾ возбуждением при $\nu = 2$. Спин-циклотронный экситон, в отличие от магнитоплазмона, оптически не активен. Он представляет собой так называемый «темный»

¹⁾ Это компонента с положительным значением проекции S_Z на направление магнитного поля, поскольку в GaAs g -фактор электрона отрицателен.

* E-mail: gorbunov@issp.ac.ru

(dark) экситон, так как его излучательная рекомбинация запрещена по спину. Тем не менее посредством резонансных межзонных переходов, а именно дипольно-разрешенных оптических переходов между дискретными состояниями тяжелых дырок валентной зоны (соответствующих уровням Ландау с номерами $n_L > 1$) и состояниями электронов зоны проводимости, можно создать неравновесный ансамбль таких магнитоэкситонов [6]. Основным каналом изменения спина 2D ЭС являются процессы переворота спина фотовозбужденной дырки за счет сильного спин-орбитального взаимодействия в валентной зоне GaAs. В процессе последующей трансформации фотовозбужденной тяжелой дырки из валентной зоны в ферми-дырку электронной системы, которая происходит вследствие рекомбинации электронов с нулевого заполненного уровня Ландау с фотовозбужденной дыркой валентной зоны, электронная система изменяет свой результирующий спин. Поскольку прямая релаксация спин-циклотронных экситонов (их также называют спин-флип-экситонами [4]) в основное состояние, сопровождающаяся изменением одновременно орбитального и спинового квантовых чисел, запрещена, время жизни этих возбуждений становится чрезвычайно большим [7]. Еще один фактор, затрудняющий релаксацию СЦЭ, связан с тем обстоятельством, что минимум их дисперсионной зависимости расположен не при нулевых обобщенных импульсах, а при $q \sim 1/l_B$ [3] (рис. 1б), поэтому для релаксации кроме энергии нужно отдать большой импульс, около 10^6 см^{-1} . В результате времена рекомбинации СЦЭ приблизительно в 10^7 раз превышают времена рекомбинации фотовозбужденной дырки (в стандартных исследуемых 2D ЭС они составляют около 100 пс). Благодаря столь большим временам жизни можно создавать высокие плотности неравновесных СЦЭ $n_{ex} \sim 10^{10} \text{ см}^{-2}$ с помощью фотовозбуждения малой мощности, не перегревающего 2D ЭС.

Спин-циклотронные экситоны являются чисто электронными возбуждениями, но могут быть названы композитными бозонами, поскольку они имеют целочисленный спин и фактически подчиняются бозе-статистике — в одном квантовом состоянии может находиться макроскопически большое число экситонов. В коллективе СЦЭ можно было бы ожидать формирования неравновесных бозонных конденсатов, аналогичных тем, что формально изучались еще в работе [9]. Однако известно, что в двумерных (а также одномерных) пространственно-неограниченных системах при любой сколь угодно низкой, но конечной темпера-

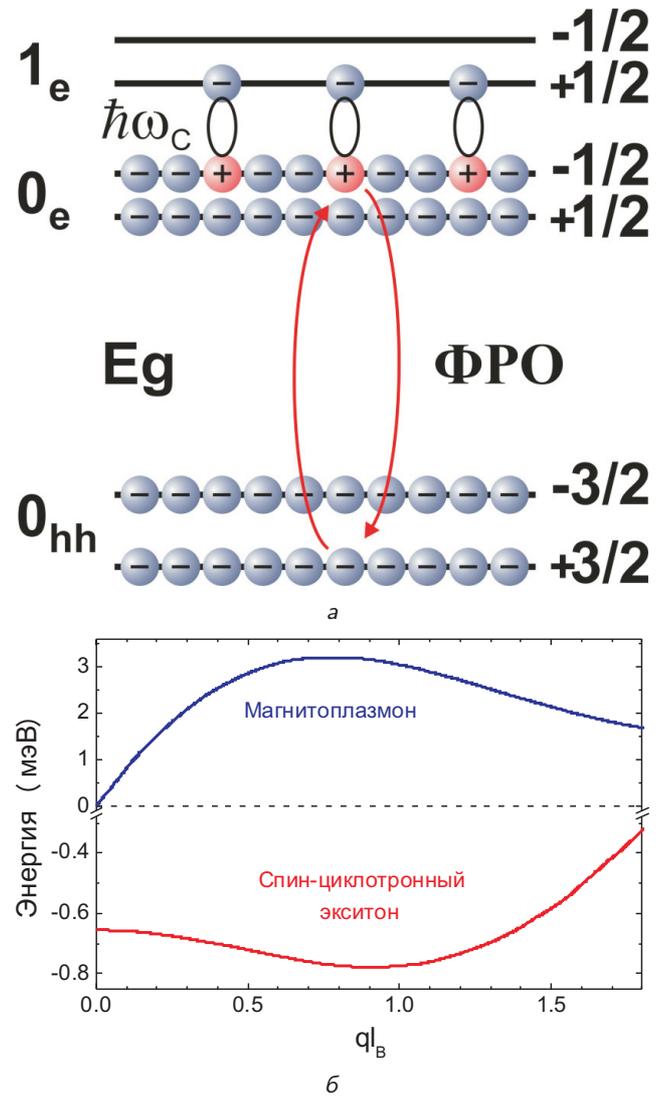


Рис. 1. а) Схема одноэлектронных состояний квантово-холловского изолятора при факторе заполнения $\nu = 2$ в условиях возбуждения триплетного спин-циклотронного магнитоэкситона. Слева указаны номера уровней Ландау для электрона в зоне проводимости (0_e , 1_e) и тяжелой дырки в валентной зоне (0_{hh}), справа — значения проекции спина S_z . Изогнутые стрелки — иллюстрация виртуального поглощения и переизлучения фотона при регистрации ФРО. E_g — ширина запрещенной зоны, $\hbar\omega_c$ — циклотронная энергия. б) Результаты расчета дисперсионной зависимости двухчастичных возбуждений в КЯ шириной 32 нм в магнитном поле 4.2 Тл [8]

туре T тепловые флуктуации разрушают дальний порядок [10, 11]. По этой причине бозе-конденсат в таких системах может существовать только при $T = 0$, что имеет не более, чем теоретический интерес. В 2D-случае тепловые флуктуации, тем не менее, не полностью разрушают

дальний порядок: пространственные электрон-электронные корреляции сохраняются, хотя и убывают с расстоянием не экспоненциально, как в газовой фазе, а по степенному закону. Этого оказывается достаточно для перехода в новую фазу, которая может обладать сверхтекучестью при конечной температуре. Эффект сверхтекучести в 2D-системах без образования бозе-конденсата был предсказан Березинским [12] и независимо, но несколько позже Костерлицем и Таулессом [13] (переход Березинского–Костерлица–Таулесса — БКТ). Согласно теории переход в сверхтекучее состояние при этом обусловлен формированием топологических дефектов: пар «вихрь-антивихрь». К настоящему времени уже имеется достаточно много экспериментальных свидетельств существования перехода БКТ в различных квазидвумерных системах: в пленках жидкого гелия [14], массивах джозефсоновских контактов [15], в охлажденных газах атомов [16, 17], в газе взаимодействующих экситонных поляритонов [18].

Поиск бозе-эйнштейновских конденсатов — одно из центральных направлений современной физики и, прежде всего, физики конденсированного состояния. Несмотря на то, что существует множество указаний на нетривиальные фазовые превращения в твердых телах, которые могут рассматриваться как переходы в конденсированное состояние, надежно установленные случаи формирования бозе-эйнштейновского конденсата немногочисленны. Конденсатные состояния можно разделить на две фундаментальные группы. Одна определяется фазовым переходом в основном термодинамически равновесном состоянии, как, например, в сверхтекучем ^4He . В последнее время, однако, особый интерес привлекают к себе так называемые нестационарные конденсаты — системы, выведенные из равновесия внешним воздействием. Несмотря на то, что детальное равновесие в них не наступает, систему можно разделить на макроскопические подсистемы, в которых наступает локальное (динамическое) «квазиравновесие», причем неравновесные подсистемы могут находиться в «квазиравновесном» состоянии достаточно долго, чтобы можно было пользоваться понятием температуры, а в самой подсистеме могла произойти бозе-эйнштейновская конденсация. К квазиравновесным можно отнести экситон-поляритонные конденсаты [19], бозе-конденсат трехмерных магнонов [20], атомные бозе-конденсаты [21, 22], бозе-конденсаты 2D-магнитоэкситонов [9, 23] и пространственно-непрямых дипольных экситонов [24–26].

Особняком в ряду конденсатных состояний стоят конденсаты в фермионных системах, которые также можно разделить на термодинамически равновесные — это сверхпроводники (включая высокотемпературные сверхпроводники), ^3He [27], состояние с суммарным фактором заполнения $\nu = 1$ в двойных электронных слоях [28], и неравновесные, такие как конденсат охлажденных атомов ^{40}K , исходно имеющих ферми-статистику [29]. В представленном обзоре обсуждается конденсация в системе 2D-фермионов (2D-электронов в зоне проводимости), выведенной из состояния равновесия путем образования ансамбля долгоживущих спин-циклотронных экситонов — композитных возбуждений с бозе-статистикой. Ансамбль спин-циклотронных экситонов достаточно большой плотности в квантово-холловском изоляторе ($\nu = 2$) при температурах ниже 1 К это еще один пример плотной бозе-системы в вырожденном двумерном ферми-газе, демонстрирующей коллективные бозевские свойства, наряду с электрон-электронными бислоями [28].

Заметим, что для рассматриваемых чисто электронных спин-циклотронных экситонов имеет место электрон-дырочная симметрия: масса и заряд возбужденного электрона равны массе и заряду (с противоположным знаком) эффективной ферми-дырки. Таким образом, пространственный перенос этих магнитоэкситонов не связан ни с переносом заряда, ни с переносом массы (в процессе переноса локальная плотность электронов в пространстве не меняется), а только с переносом энергии возбуждений и их спина. При конденсации таких возбуждений в когерентное коллективное состояние можно ожидать бездиссипативное распространение спина на макроскопические расстояния.

2. МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТОВ

2.1. Образцы

Исследовались гетероструктуры, содержащие одиночную, симметрично легированную, квантовую яму (КЯ) GaAs/AlGaAs шириной от 25 до 35 нм с концентрацией электронов в 2D-канале $n_e \cong 2 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ и темновой подвижностью $\mu_e = (10\text{--}20) \cdot 10^6 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$. Симметричное легирование необходимо, чтобы минимизировать проникновение волновой функции электронов проводимости в барьер и уменьшить вклад в релаксацию возбужденных электронов случайного потенциала на гетерограницах КЯ и примесных состояний в барьере. Выбор ширины квантовой ямы

обоснован двумя обстоятельствами. Более узкие квантовые ямы (20–25 нм) не обеспечивают требуемой высокой подвижности электронов, а более широкие квантовые ямы (35–40 нм) не позволяют создать желаемую степень неравновесности. Дело в том, что время релаксации неравновесных спин-флип-экситонов быстро укорачивается с ростом ширины квантовой ямы из-за уменьшения глубины кулоновского минимума на дисперсионной кривой [3] (рис. 1б). Оптимальная ширина квантовой ямы для создания неравновесного ансамбля СЦЭ при $\nu = 2$ получается при ширине квантовой ямы 30–35 нм. Время их релаксации при других целочисленных факторах заполнения намного короче (см., например, [30]). В настоящее время создание квазистационарных неравновесных систем спин-циклотронных экситонов с концентрациями $n_{ex} \gtrsim 10^{10} \text{ см}^{-2}$ при целочисленных факторах заполнения, отличных от $\nu = 2$, представляется невозможным.

2.2. Диагностирование «темных» триплетных экситонов

Как уже упоминалось, спин-циклотронные экситоны являются «темными», т. е. не взаимодействуют со светом в дипольном приближении. Это обстоятельство не мешает обнаруживать их существование с помощью неупругого рассеяния света (НРС) [4]. Однако эксперименты по измерению НРС трудоемки и требуют больших времен накопления.

В этой связи была отработана экспериментальная методика [6], с помощью которой можно возбуждать светом ансамбль трансляционно-инвариантных, т. е. свободных СЦЭ, контролировать их плотность и исследовать кинетику релаксации в основном состоянии (речь идет об измерениях безызлучательного времени жизни СЦЭ). Предложенный метод основан на измерениях резонансного отражения в результате прямых межзонных дипольно-разрешенных переходов между дискретными состояниями (уровнями Ландау) тяжелых дырок валентной зоны и дискретными состояниями электронов (уровнями Ландау) в зоне проводимости (см. рис. 1а). Априори можно предполагать, что в условиях тестирования холловского изолятора при факторе заполнения $\nu = 2$ сигнал резонансного отражения, соответствующий прямому переходу с нулевого уровня Ландау тяжелых дырок валентной зоны ($n_L^{hh} = 0$) на нулевой уровень Ландау электронов зоны проводимости ($n_L^e = 0$), должен отсутствовать, поскольку все электронные состояния основного электронного

циклотронного уровня полностью заполнены. При включении оптической накачки, которая возбуждает электроны посредством дипольно-разрешенных межзонных резонансных переходов на верхние уровни Ландау ($n_L^e > 1$) при достаточно низкой температуре, естественно ожидать образования СЦЭ с проекцией спина $S_z = +1$. Именно эти экситоны являются возбужденным состоянием с наименьшей энергией в двумерной электронной системе GaAs/AlGaAs в магнитном поле. Процесс формирования СЦЭ должен проявиться в уменьшении числа незаполненных состояний первого электронного уровня Ландау ($n_L^e = 1$) и в одновременном возникновении незаполненных состояний (ферми-дырок) на нулевом электронном уровне ($n_L^e = 0$). Соответствующие изменения в спектрах отражения естественно назвать фотоиндуцированным резонансным отражением (ФРО). В спектрах ФРО должны наблюдаться два резонансных пика. Пик, соответствующий оптическому переходу (0–0) с нулевого циклотронного уровня тяжелых дырок $n_L^{hh} = 0$ на верхний спиновый подуровень нулевого циклотронного уровня двумерных электронов $n_L^e = 0$, должен быть положительным, а пик, отвечающий переходу (1–1) с первого циклотронного уровня тяжелых дырок валентной зоны $n_L^{hh} = 1$ на первый электронный циклотронный уровень $n_L^e = 1$, — отрицательным. Положительный пик ответственен за возникновение и рост с накачкой числа ферми-дырок на верхнем спиновом подуровне нулевого циклотронного уровня электронов $n_L^e = 0$, а отрицательный пик — за уменьшение с ростом накачки числа ферми-дырок на первом циклотронном электронном уровне $n_L^e = 1$. Метод ФРО является непрямым способом тестирования оптически неактивных СЦЭ с использованием оптически разрешенных переходов (0–0) и (1–1) из валентной зоны в зону проводимости.

Обычно в эксперименте удобнее измерять слабый сигнал на небольшом фоне, чем малую разницу между двумя большими сигналами. Поэтому в большинстве случаев контролировалась дырочная составляющая СЦЭ, но именно измерение интенсивности ФРО для фотовозбужденных электронов позволяет корректно и с достаточно высокой точностью оценить концентрацию СЦЭ. В этом случае максимальный сигнал ФРО, наблюдаемый в равновесии (при выключенной накачке), служит эталоном для сравнения с максимально возможным числом состояний на первом уровне Ландау. Сигнал же ФРО для неравновесных ферми-дырок на нулевом уровне Ландау всегда наблюдается на некотором

фоне, амплитуда которого определяется рядом факторов, трудно поддающихся количественной оценке.

Еще один способ детектирования «темных» спин-флип-экситонов, обнаруженный в ходе экспериментов, связан с тем, что при создании в холловском изоляторе неравновесных возбуждений в спектрах фотолюминесценции (ФЛ) появляются дополнительные линии, связанные с трансляционно-инвариантными 3-частичными комплексами, построенными из СЦЭ и ферми-дырки на нулевом электронном уровне Ландау [31, 32]. Эти линии являются своего рода сигнальными метками о появлении в системе спин-флип-экситонов. Подробнее природа этого явления обсуждается в разд. 3.3.2 экспериментальных результатов.

2.3. Спектральные измерения

Образец с характерными размерами 3×3 мм² помещался во вставку с жидким ³He, оснащенную системой откачки его паров. Эта вставка, в свою очередь, устанавливалась в криостат с жидким ⁴He и сверхпроводящим соленоидом. Используемая криосистема позволяла выполнять экспериментальные исследования, опускаясь до температуры $T \approx 0.45$ К в магнитных полях B вплоть до 14 Тл. Оптические измерения, не требующие высокого пространственного разрешения, проводились с использованием двух многомодовых кварцевых световодов диаметром 400 мкм и с числовой апертурой 0.39. Один световод использовался для подвода к образцу лазерного излучения, а второй служил для сбора излучения от образца и последующей его передачи на входную щель дифракционного спектрометра с регистрирующей охлаждаемой ПЗС-камерой. При измерениях резонансного отражения световоды устанавливались симметрично, под углом около 10° к нормали образца, так чтобы направление отраженного от образца зондирующего лазерного пучка совпадало с осью принимающего световода. Для подавления вклада лазерного света, рассеянного и отраженного от поверхностей образца и световодов, использовались скрещенные линейные поляризаторы, установленные между торцами световодов и образцом. В работе использовались два перестраиваемых по длине волны непрерывных лазера с шириной лазерной линии 5 и 1 МГц: один — для резонансного возбуждения 2D ЭС, а другой — для измерения спектров ФРО, фотолюминесценции (ФЛ) и неупругого рассеяния света (НРС). Кроме того, в ряде экспериментов для накачки использовался одномодовый лазер-

ный диод (длина волны $\lambda \approx 780$ нм), с помощью которого обеспечивалось нерезонансное подбарьерное (энергия кванта меньше ширины запрещенной зоны в барьере AlGaAs) фотовозбуждение изучаемой 2D ЭС. Размер пятна накачки/зондирования составлял $d_{pump} \approx 1.5$ мм. Во избежание эффектов перегрева мощность лазерной накачки, возбуждающей электроны на высоко расположенные уровни Ландау с квантовыми номерами $n_L^e > 1$, не превышала 0.3 мВт. Мощность вводимого в тот же световод излучения зондирующего лазера была на порядок меньше. Спектр резонансного отражения измерялся с помощью сканирования длины волны зондирующего лазера и регистрации интенсивности лазерной линии ПЗС-камерой на выходе спектрометра. Дифференциальный спектр ФРО получался как разность спектров резонансного отражения при включенной резонансной лазерной накачке и без нее.

2.4. Измерения кинетики ФРО

При измерениях кинетики ФРО излучение непрерывной лазерной накачки модулировалось механическим прерывателем — вращающимся диском с радиальной щелью. Период следования лазерных импульсов составил около 11 микросекунд, а длительность — не более 3 мс. За счет фокусировки лазерного пятна на поверхность диска длительность фронта/спада лазерного импульса удавалось укоротить примерно до 2 мкс. В некоторых экспериментах для фотовозбуждения использовался лазерный диод ($\lambda \approx 780$ нм), ток которого модулировался с помощью генератора прямоугольных импульсов с длительностью фронта/спада около 10 нс. Длина волны зондирующего лазера устанавливалась на максимум/минимум в спектре ФРО для записи кривой соответственно убывания/нарастания сигнала после окончания импульса накачки. Отраженное от поверхности образца тестирующее лазерное излучение пропускать через узкополосный интерференционный светофильтр (ширина полосы около 1.1 нм) для отсекания света лазера накачки и затем фокусировалось на вход кремниевого лавинного фотодиода, работающего в режиме регистрации одиночных фотонов. С помощью системы счета фотонов с временным стробированием сигнал резонансного отражения измерялся и накапливался как функция временной задержки от момента выключения возбуждающего лазерного импульса — в результате регистрировалась кривая затухания (либо нарастания) ФРО.

2.5. Измерения с пространственным разрешением

Для измерений с пространственным разрешением была изготовлена ^3He -вставка с оптическим окном, которая, в свою очередь, устанавливалась в ^4He -криостат со сверхпроводящим соленоидом. Эксперименты проводились при температурах от 0.55 К до 1.5 К в магнитном поле до 6 Тл, направленном перпендикулярно плоскости КЯ. Для формирования ансамбля неравновесных СЦЭ и возбуждения сигнала ФЛ использовался одномодовый лазерный диод ($\lambda \approx 780$ нм), а для контроля резонансного отражения — перестраиваемый непрерывный лазер с шириной линии 1 МГц. Внутри вставки с ^3He была установлена светосильная двухлинзовая проекционная система, с помощью которой лазерное излучение фокусировалось на поверхность исследуемого образца. Для достижения точной фокусировки образец плавно перемещался вдоль оптической оси с помощью узла механической подачи. Минимальный размер пятна накачки на образце составлял примерно 5 мкм. С помощью той же пары линз излучение резонансного отражения и ФЛ выводилось наружу в виде параллельного пучка. Увеличенное изображение образца ($\times 23$) проецировалось длиннофокусным объективом ($f = 360$ мм) на входную щель решетчатого спектрометра с охлаждаемой ПЗС-камерой. Изображение образца в свете ФЛ наблюдалось либо в нулевом порядке решетки спектрометра, либо с помощью отдельной охлаждаемой ПЗС-камеры. Спектральная селекция проводилась с помощью полосового интерференционного светофильтра. Для подавления сигнала отражения от поверхности образца использовалась пара скрещенных линейных поляризаторов, помещенных вне криостата: один на входе, в луче зондирующего лазера, а другой на выходе, в отраженном пучке.

2.6. Измерения пространственной когерентности

Количественно пространственную когерентность можно оценить с помощью интерференционного сложения двух волн с интенсивностями $I_1(\mathbf{r})$ и $I_2(\mathbf{r})$, которое в общем случае приводит к распределению вида (см., например, [33])

$$I_{if}(\mathbf{r}) = I_1(\mathbf{r}) + I_2(\mathbf{r}) + 2\sqrt{I_1(\mathbf{r})I_2(\mathbf{r})}g^{(1)}(\mathbf{r})\cos\Phi(\mathbf{r}),$$

где \mathbf{r} — пространственная координата, а $\Phi(\mathbf{r})$ — распределение разности фаз между интерферирующими волнами. Степень когерентности определяется

абсолютной величиной нормированного комплексного коррелятора первого порядка, $|g^{(1)}(\mathbf{r})|$, изменяющейся в пределах от нуля (некогерентное излучение) до единицы (когерентное излучение). Коррелятор связан соотношением

$$g^{(1)}(\mathbf{r}) = \frac{V(\mathbf{r})(I_1(\mathbf{r}) + I_2(\mathbf{r}))}{2\sqrt{I_1(\mathbf{r})I_2(\mathbf{r})}}$$

с видностью интерференционных полос $V = (I_{\max} - I_{\min}) / (I_{\max} + I_{\min})$. Зависимость величины $|g^{(1)}|$ от координаты x в плоскости волнового фронта в общем случае можно описать функцией $\exp(-|x|/\xi)$. Поперечная длина пространственной когерентности ξ стремится к нулю в случае некогерентного источника света и к бесконечности — в случае когерентного. Однако, как уже упоминалось во Введении, в однородном двумерном газе взаимодействующих бозонов должен происходить переход БКТ в сверхпроводящую фазу, а для нее характерно убывание $|g^{(1)}(x)|$ по степенному закону [12, 13]. Сравнительно недавно для конденсата внутривибрационных экситонных поляритонов было экспериментально зарегистрировано степенное уменьшение $g^{(1)}(x)$ на расстояниях примерно до 40 мкм [34].

В экспериментах использовался интерферометр Майкельсона с неполяризуемым светоделительным кубиком и параллельными пучками, в одном из плеч которого вместо зеркала установлена 90-градусная призма, оборачивающая изображение. Извлеченное из криостата с оптическим окном увеличенное изображение образца в свете резонансного отражения проецировалось в фокальную плоскость микроскопного объектива $\times 10$ ($f_1 = 20$ мм) на входе в интерферометр. Вместе с объективом $f_2 = 190$ мм на выходе они образуют дополнительный каскад увеличения, которое достигает $\times 170$. В плоскости выходного изображения интерферометра охлаждаемая ПЗС-камера регистрирует два изображения образца, развернутые друг относительно друга на 180° и промодулированные слегка искривленными интерференционными полосами, параллельными ребру призмы. Видность полос $V(\delta)$ и коррелятор $g^{(1)}(\delta)$ симметрично убывают по обе стороны от линии, соответствующей нулевому сдвигу между изображениями, $\delta = 0$.

Известно, что при передаче изображения проекционной оптической системой даже в случае некогерентного светового источника пространствен-

ное распределение степени когерентности не будет дельта-функцией из-за дифракции на входной апертуре [33]. При круглом входном зрачке аппаратная функция описывается выражением $g^{(1)}(\nu) = 2J_1(\nu)/\nu$, где $J_1(\nu)$ — функция Бесселя первого рода и первого порядка, $\nu = 2\pi\delta \sin \alpha/\lambda$, а $\sin \alpha$ — числовая апертура оптической системы, λ — длина волны света. Положение первого нуля этой функции определяет оптическое разрешение системы [33]. Апертура ближайшей к образцу короткофокусной ($f = 15$ мм) асферической линзы составляла $\sin \alpha \simeq 0.5$, т.е. расчетное разрешение примерно равно 1 мкм.

Пространственное распределение коррелятора $g^{(1)}(\mathbf{r})$ получалось путем регистрации отдельно распределений интенсивности для каждого из плеч интерферометра, $I_1(\mathbf{r})$ и $I_2(\mathbf{r})$, собственно интерферограммы $I_{if}(\mathbf{r})$ и построения на их основе распределения $g^{(1)}(\mathbf{r}) \cos \Phi(\mathbf{r})$. Для повышения точности измерений на записанной интерферограмме выбирался участок, внутри которого полосы можно считать прямыми. В результате суммирования интенсивности вдоль полос получались профили $I_{if}(\delta)$, $I_1(\delta)$ и $I_2(\delta)$, из которых извлекалась знакопеременная функция $g^{(1)}(\delta) \cos \Phi(\delta)$, огибающая которой и есть искомая зависимость $g^{(1)}(\delta)$. Точность ее определения повышается при переходе к модулю: $|g^{(1)}(\delta) \cos \Phi(\delta)|$.

Для анализа когерентных свойств резонансно отраженного света необходимо использовать низкокогерентный (в идеале — некогерентный) источник излучения, поэтому луч зондирующего лазера фокусировался на поверхность вращающегося матового стекла в пятно, изображение которого проецировалось на поверхность образца. Размер пятна зондирования на образце был равен примерно 50 мкм, при этом пятно накачки размером около 5 мкм находилось в его центре. Для подавления вклада в интерферограмму от когерентного излучения лазерного диода накачки отраженный пучок пропускался через интерференционный светофильтр с шириной полосы 10 нм и центральной длиной волны 820 нм. Измерение аппаратной функции системы в отраженном свете зондирующего лазера проводилось при минимальной температуре, $T = 0.55$ К, и в нулевом магнитном поле, $B = 0$. Следует отметить высокую чувствительность методики измерений к точности фокусировки на поверхность образца: только при оптимальной настройке удается приблизиться к пространственному разрешению около 1 мкм (см. ниже рис. 3а).

3. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

3.1. Спектры ФРО

Выполненные эксперименты [6] полностью подтверждают изложенную выше суть метода ФРО. По спектрам ФРО при факторе заполнения $\nu = 2$ (см. рис. 2) удается контролировать рождение фотовозбужденных электронов на первом уровне Ландау ($n_L^e = 1$) и ферми-дырок на нулевом уровне Ландау ($n_L^e = 0$) 2D ЭС. На рис. 2 представлен также измеренный в тех же условиях спектр ФЛ. На нем отчетливо виден соответствующий электронным переходам (0–0) циркулярно-поляризованный дублет: σ^+ - и σ^- -компоненты. Величина дублетного расщепления соответствует сумме спинового расщепления в магнитном поле основного циклотронного уровня тяжелых дырок валентной зоны $n_L^{hh} = 0$ и спинового расщепления основного циклотронного уровня двумерных электронов зоны проводимости $n_L^e = 0$. В спектре ФРО в полном соответствии с изложенными выше ожиданиями виден положительный пик в области электронных переходов (0–0), а также отрицательный пик в области переходов (1–1). С ростом плотности мощности накачки интен-

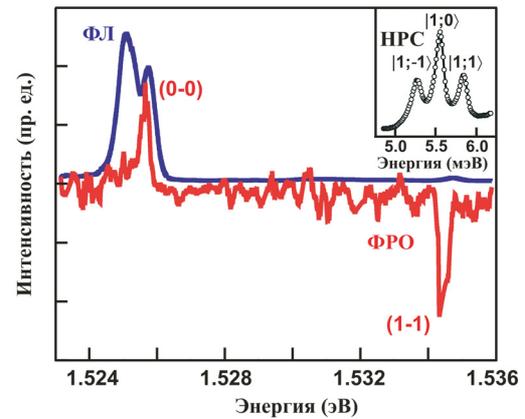


Рис. 2. Спектры ФЛ и ФРО при $\nu = 2$, измеренные в КЯ GaAs/AlGaAs шириной 17 нм ($\mu_e \cong 5 \cdot 10^6$ см²/В · с, $n_e \cong 2.4 \cdot 10^{11}$ см⁻²) в перпендикулярном плоскости КЯ магнитном поле $B_{\perp} = 5$ Тл при температуре $T = 0.45$ К. Оптический переход (0–0) происходит между основными циклотронными уровнями электронов зоны проводимости ($n_L^e = 0$) и тяжелых дырок валентной зоны ($n_L^{hh} = 0$), переход (1–1) — между первыми циклотронными уровнями: $n_L^e = 1$ и $n_L^{hh} = 1$. На вставке — спектр резонансного НРС, измеренный при тех же экспериментальных условиях и при параллельной компоненте магнитного поля $B_{\parallel} = 5$ Тл, введенной для усиления зеемановского расщепления спиновых компонент экситонного триплета $|S; S_z\rangle$

сивность этих пиков ведет себя согласованным образом: положительный пик вырастает, а отрицательный уменьшается. Такое поведение спектров ФРО обусловлено образованием СЦЭ, состоящих из электронов первого электронного уровня Ландау $n_L^e = 1$, связанных с ферми-дырками нулевого электронного уровня $n_L^e = 0$ (см. диаграмму переходов на рис. 1а). Исходя из зарегистрированных максимальных величин снижения интенсивности сигнала ФРО для перехода (1–1), можно сделать вывод, что в проводимых экспериментах доля неравновесных СЦЭ, возбужденных в плотном ансамбле 2D-электронов, достигает 10–15 % от общего числа электронных состояний на одном уровне Ландау.

Несмотря на то, что триплетные СЦЭ не являются оптически активными, их существование можно установить прямым образом по спектрам НРС (см. вставку на рис. 2) и с их помощью непосредственно определить величину синглет-триплетного расщепления экситонов [6, 35]. Синглет-триплетное экситонное расщепление измеряется как разность энергий синглетного экситона и центра тяжести экситонного триплета (положения в спектре спиновой компоненты с $S_z = 0$), наблюдаемого в спектрах НРС. Это расщепление оказалось сравнительно большим, около 1 мэВ [6].

3.2. Времена жизни спиновых циклотронных экситонов

Использование техники ФРО в импульсном режиме (см. [6]) оказалось очень эффективным для исследования времен релаксации τ , т. е. времен жизни СЦЭ в зависимости от температуры T , величины магнитного поля B , ширины КЯ, и, что очень важно, качества гетероструктур. Времена релаксации триплетных магнитоэкситонов оказались чрезвычайно большими: в самых высококачественных структурах они достигают масштабов миллисекунды. Иллюстрация кинетики затухания сигнала ФРО для двух КЯ различной ширины в области оптических переходов (0–0) представлена на рис. 3. Видно, что кинетика затухания сигналов ФРО — экспоненциальная, а времена затухания (или времена спиновой релаксации) составляют десятки микросекунд. Кинетика нарастания сигнала ФРО в области переходов (1–1) происходит на таких же масштабах времени, что указывает на общую динамику релаксации экситонных состояний, формирующихся из электронов на первом ($n_L^e = 1$), а ферми-дырок — на нулевом ($n_L^e = 0$) уровнях Ландау. Эта общность проявляется также и в температур-

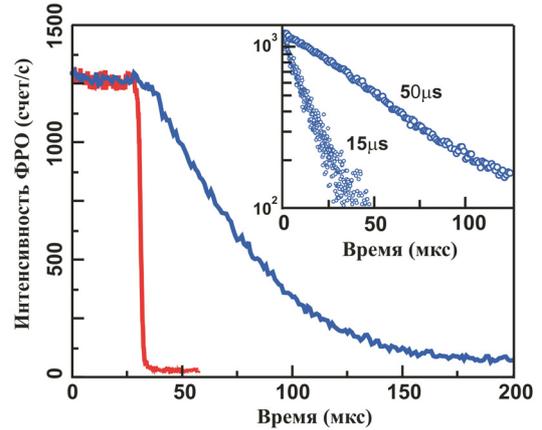


Рис. 3. Пример кинетики затухания ФРО (синяя кривая) и для сравнения — аппаратная функция измерительной системы (красная кривая). На вставке — в полулогарифмическом масштабе кинетика затухания для КЯ шириной 35 (длинная кинетика) и 17 нм (короткая кинетика) при $\nu = 2$ в поле $B_{\perp} = 4$ Тл. Концентрация $n_e = 2 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$, подвижности $\mu_e = 15 \cdot 10^6 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$ и $\mu_e = 5 \cdot 10^6 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$, соответственно

ной зависимости скорости релаксации, представленной на рис. 4. Видно, что при $T > 1$ К зависимость скорости релаксации от температуры имеет экспоненциальный характер

$$\tau^{-1}(T) = \tau_1^{-1} \exp\left(-\frac{\Delta}{k_B T}\right)$$

с характерным временем $\tau_1 \approx 1$ нс и величиной активационной щели $\frac{\Delta}{k_B} \approx 11$ К (k_B — постоянная Больцмана). Такое поведение показывает, что в данной температурной области существует активационный канал релаксации, включающий в себя процессы переворота электронного спина из-за спин-орбитального взаимодействия, увеличения экситонной энергии до циклотронной энергии и последующего испускания фотона с циклотронной энергией [7]. В этих условиях измеренная активационная щель есть не что иное, как кулоновская энергия связи триплетного экситона, равная энергии синглет-триплетного экситонного расщепления, которая, в свою очередь, может быть измерена независимым образом по спектрам НРС.

В низкотемпературной области, $T < 1$ К, кинетика ФРО перестает зависеть от температуры и время релаксации постоянно, $\tau = \tau_0$ (рис. 4). В этой области температур происходит смена механизма релаксации и этот механизм, с очевидностью, уже не является термоактивационным. Здесь величина τ определяется исключительно качеством гетеро-

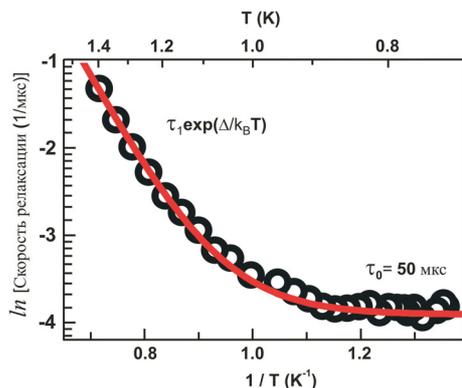


Рис. 4. Поведение скорости релаксации триплетных магнитоэкситонов при изменении температуры в КЯ шириной 35 нм при $B_{\perp} = 4$ Тл. Кружки — эксперимент, сплошная линия — аппроксимация с учетом двух механизмов релаксации: активационного и не зависящего от температуры

структуры: чем выше качество, тем длиннее время спиновой релаксации.

4. МАГНИТОЭКСИТОННЫЙ КОНДЕНСАТ

4.1. Фазовый переход

Обнаруженные большие времена жизни СЦЭ в 2D ЭС, рекордные для трансляционно-инвариантных систем, открыли уникальную возможность изучения при достаточно низких температурах вырожденной фермиевской системы, в которой с помощью света возбужден плотный ансамбль долгоживущих триплетных спин-флип-экситонов, подчиняющихся бозе-статистике.

На рис. 5а и б приведены результаты измерений соответственно интенсивности сигнала ФРО (дифференциала резонансного отражения) I и времени его затухания τ в зависимости от температуры T при фиксированной плотности мощности оптической накачки ($P_{\text{pump}} \approx 30$ мВт/см²), создающей достаточно высокую плотность СЦЭ, $n_{\text{ex}} \sim 10^{10}$ см⁻². Оказывается, что при понижении температуры в области $T \leq 0.8$ К интенсивность ФРО резко возрастает, более чем на порядок (рис. 5а). Пороговый характер этого явления указывает на возникновение новой конденсированной фазы СЦЭ с большей плотностью (с большими числами заполнения). Это заключение подтверждается поведением в тех же условиях времени жизни СЦЭ. В окрестности порога, $T \approx 0.8$ К, и при дальнейшем понижении температуры сигнал ФРО возрастает даже там, где $\tau(T)$ уменьшается (см. рис. 5б). Пороговая температура T_c для возрастания ФРО оказалась чув-

ствительной к интенсивности оптической накачки: при уменьшении P_{pump} она сдвигается в сторону более низких температур. Поведение порога возрастания дифференциала ФРО в зависимости от температуры и накачки позволяет определить фазовую диаграмму с границей, разделяющей области существования экситонного газа и новой, более плотной, конденсированной фазы СЦЭ, которую логично назвать магнитоэкситонным конденсатом [36]. Экспериментально измеренная фазовая диаграмма представлена на рис. 5в. На вставке к рис. 5в продемонстрировано, как именно определялся порог возникновения новой экситонной фазы: отсчет критической температуры T_c проводился на половине высоты ступеньки, наблюдаемой для параметра $f(T) = I(T)\tau(T)$, пропорционального силе осциллятора оптического перехода (0–0).

Из того обстоятельства, что при неизменной плотности экситонов понижение температуры приводит к значительному возрастанию силы осциллятора, следует, что в точке фазового перехода резко усиливается отклик на внешнее электромагнитное поле входящих в состав СЦЭ ферми-дырок на нулевом электронном уровне Ландау. Резонансное отражение можно разделить на два процесса: поглощение и следующее за ним испускание резонансного фотона с переходом системы в исходное начальное состояние. Достаточно рассмотреть процесс резонансного поглощения с возбуждением электрона из валентной зоны в зону проводимости на вакантное место, возникающее после рождения СЦЭ: на ферми-дырку на нулевом уровне Ландау. Если начальное состояние ансамбля СЦЭ подчиняется больцмановскому распределению и их число существенно меньше числа электронных состояний на уровне Ландау N_{ϕ} , то несложно показать, что квадрат матричного элемента оптического перехода пропорционален $1/N_{\phi}$ и не зависит от температуры. В случае же конденсации N СЦЭ в одно и то же квантовое состояние квадрат матричного элемента оптического перехода пропорционален N/N_{ϕ} [36]. Строгое рассмотрение задачи о поглощении света некогерентным и когерентным ансамблями спин-циклотронных магнитоэкситонов в квантово-холловском диэлектрике проведено в работах [37, 38].

4.2. Растекание конденсата

Рисунок 5б демонстрирует характер поведения времени жизни (времени спиновой релаксации) СЦЭ $\tau(T)$ при фиксированной накачке и снижении

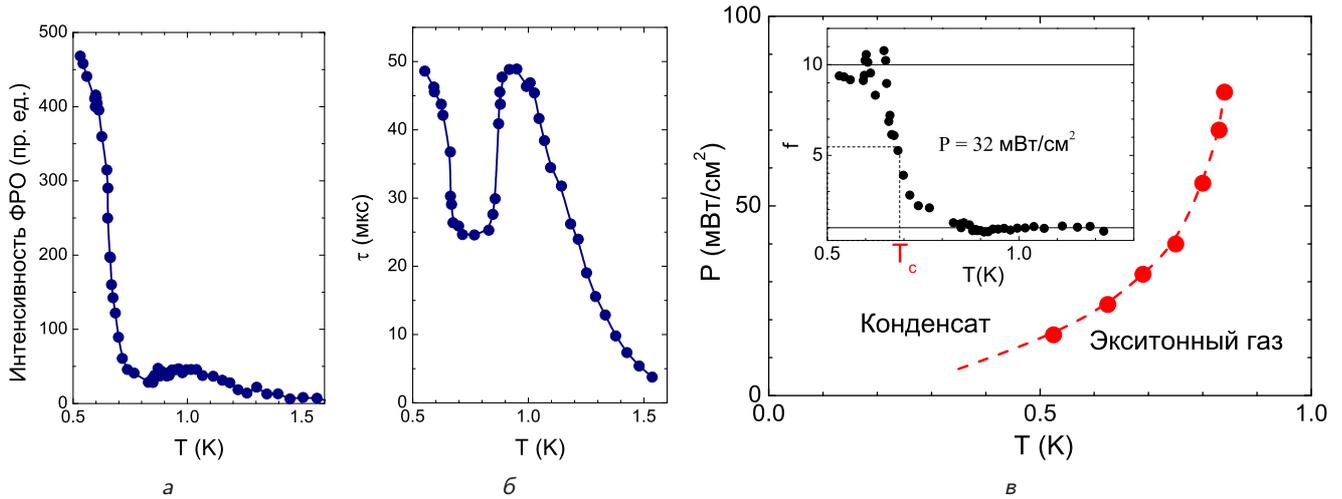


Рис. 5. Температурные зависимости: интенсивности сигнала ФРО (а), времени жизни $\tau(T)$ для СЦЭ в условиях стационарного фотовозбуждения при накачке $P_{pump} \approx 30$ мВт/см² (б) и фазовой границы, разделяющей области существования некогерентного газа и конденсата СЦЭ (в). На вставке — демонстрация способа определения критической температуры T_c : по полувысоте ступеньки для силы осциллятора $f(T)$ оптического перехода (0–0) при фиксированной мощности накачки

температуры. Как видно, ведет оно себя немонотонно: сначала возрастает, что естественно для температурно-активированного процесса, а затем начинает уменьшаться, что выглядит совершенно неожиданным. Сложно себе представить, чтобы при столь незначительном изменении температуры экситонного ансамбля — всего лишь на 0.2 К — мог кардинально измениться механизм релаксации. Поскольку в проводившихся измерениях сигнал ФРО собирался непосредственно из области фотовозбуждения, то гораздо более реалистичным выглядит предположение о пороговом ускорении растекания экситонов из области пятна накачки к центрам релаксации (рекомбинации) за счет, например, уменьшения вязкости в подсистеме неравновесных СЦЭ.

Гипотеза о быстром растекании магнитоэкситонного конденсата на макроскопически большие расстояния была проверена экспериментально с помощью пространственного разнесения световодов, используемых для возбуждения и детектирования СЦЭ [36]. Схема эксперимента и результат экспериментального наблюдения иллюстрирует рис. 6. Здесь для подвода излучения оптической накачки используется дополнительный третий световод (на рис. 6 слева). СЦЭ возбуждаются в лазерном пятне размером около 0.4 мм непосредственно под этим световодом. Пара других световодов, установленных обычным образом для измерения сигнала ФРО, связанного с ферми-дырками в составе СЦЭ,

располагается на расстоянии примерно 2 мм от первого (на рис. 6 справа). Пока температура относительно высока ($T > 1$ К), даже при интенсивном фотовозбуждении сигнал ФРО для электронного перехода (0–0) ничтожно мал и теряется в шумах, обусловленных остаточным рассеянным светом. При понижении температуры и при той же фиксированной оптической накачке в области $T \lesssim 0.75$ К сигнал резонансного отражения резко возрастает пороговым образом. Это наблюдение, согласующееся с фазовой диаграммой на рис. 5в, доказывает, что значительная часть фотовозбужденных СЦЭ в условиях их конденсации в фермиевской электронной 2D-системе растекается из области возбуждения на макроскопически большие расстояния недиффузионным образом.

Растекание магнитоэкситонного конденсата удалось визуализировать, используя криостат с оптическим окном, позволяющий видеть образец в свете ФЛ либо резонансного отражения [39]. Эксперимент заключался в регистрации изображения ФРО с помощью широкого пятна зондирующего лазера ($\gtrsim 200$ мкм) при оптической накачке в пятно размером около 10 мкм, расположенное в центре пятна зондирования. Выход спиновых экситонов из пятна возбуждения не наблюдается до тех пор, пока их плотность меньше критического значения для образования магнитоэкситонного конденсата. Пятно накачки визуализируется с помощью ФЛ, соответствующей оптически разрешенному каналу рекомбина-

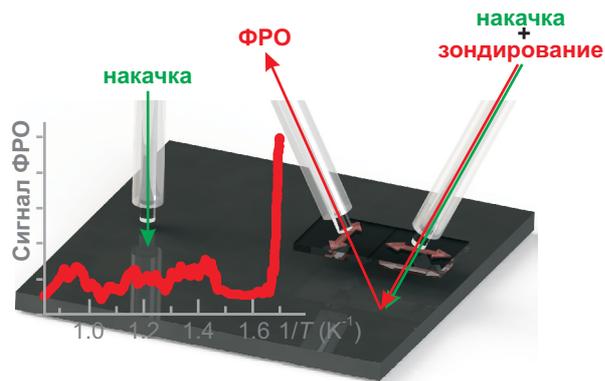


Рис. 6. Схема экспериментов по измерению ФРО. Стандартная двухсветоводная схема регистрации ФРО (справа) и дополнительный световод накачки для измерений ФРО с пространственным разделением (слева). На вставке — температурная зависимость сигнала ФРО, зарегистрированного на расстоянии примерно 2 мм от пятна накачки

ции электронов с нулевого уровня Ландау 0_e в зоне проводимости на нулевой уровень Ландау 0_{hh} тяжелых дырок в валентной зоне. Соответствующее время рекомбинации составляет около 100 пс, и размер люминесцентного пятна остается постоянным при любой исследуемой температуре (рис. 7а). С учетом пространственного разрешения оптической системы длина диффузии в газе спиновых экситонов не превышает 2 мкм. Когда же происходит фазовый переход в конденсированное состояние, длины пробега СЦЭ от пятна возбуждения становятся макроскопическими (рис. 7б, в). При этом расстояние, на которое спин-флип-экситоны распространяются по образцу, растет с размером пятна возбуждения и с мощностью накачки. В частности, длина пробега СЦЭ, показанная на рис. 7в, превышает 200 мкм при диаметре пятна накачки 20 мкм. Распределение СЦЭ от края пятна фотовозбуждения к фронту пятна их распространения не описывается гауссовым распределением. Вместо этого наблюдается плато плотности СЦЭ по всему пятну распространения (рис. 7г). Таким образом, перенос спин-флип-экситонов не является диффузионным процессом. Поскольку длина распространения СЦЭ зависит от температуры (рис. 7д), можно либо полностью блокировать их распространение, либо разрешить его на определенное расстояние, изменяя температуру в узком диапазоне около 0.2 К.

Еще один способ диагностирования растекания магнитоэкситонного конденсата связан с упомянутыми в разд. 2.2 «сигнальными метками» СЦЭ, наблюдаемыми в спектрах ФЛ. Как было показано в работе [31], при малых концентраци-

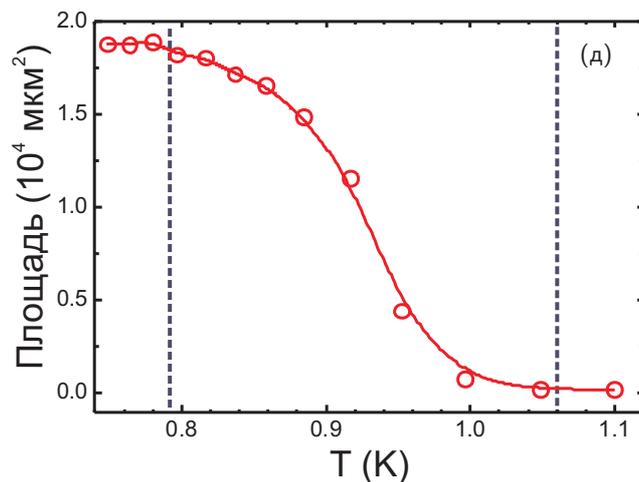
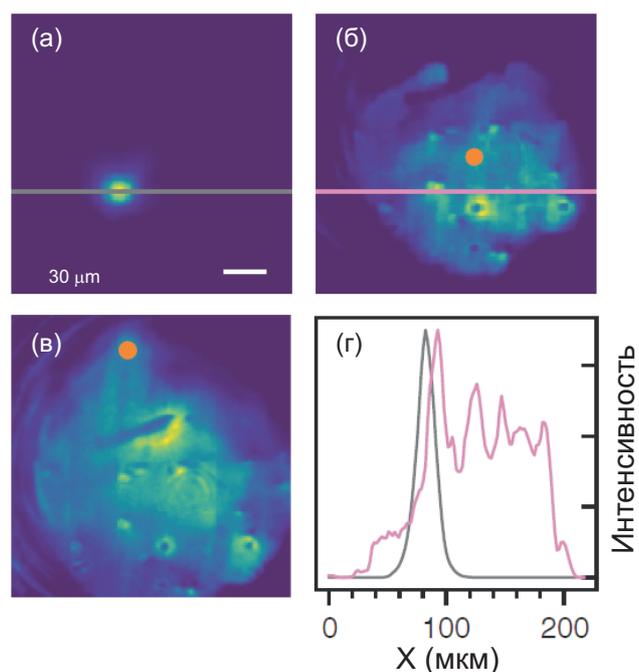


Рис. 7. Распространение СЦЭ на макроскопические расстояния. а) Пятно фотовозбуждения, наблюдаемое в свете ФЛ — оптический переход (0–0), б), в) Изображения в свете ФРО одной и той же области образца при разных положениях пятна возбуждения (оранжевый кружок). г) Сечения интенсивностей ФЛ и ФРО вдоль линий, показанных на (а) и (б). $T \approx 0.5$ К, $P_{pump} = 80$ мВт/см². д) Температурная зависимость площади растекания СЦЭ. Фазовый переход в магнитоэкситонный конденсат происходит между двумя пунктирными линиями

ях спин-флип-магнитоэкситонов в спектре ФЛ доминируют две одночастичные линии: одна в поляризации σ^- , а другая — в поляризации σ^+ (спектр (1) на рис. 8). Эти линии отвечают излучательной рекомбинации электронов с проекцией

спина $+1/2$ и $-1/2$ с тяжелыми дырками с проекциями спина соответственно $-3/2$ и $+3/2$. По мере накопления темных СЦЭ в спектре ФЛ появляются две дополнительные линии, отвечающие рекомбинации многочастичных комплексов, составной частью которых оказывается спин-флип-магнитоэкситон. Одна из этих линий (линия «PIn») проявляется в σ^- -поляризации и имеет значительный энергетический сдвиг в сторону меньших энергий. Другая дополнительная линия (линия «T») наблюдается в σ^+ -поляризации и имеет значительно меньший энергетический сдвиг по сравнению с одночастичным переходом. В работе [31] было также показано, что оптические переходы в трехчастичных трансляционно-инвариантных комплексах разрешены, если эти переходы идут в симметрично разрешенном канале. Одиночная фотовозбужденная тяжелая дырка в валентной зоне связывается в трионное состояние с СЦЭ, а затем в рамках однофотонного процесса переходит из валентной зоны в состояние ферми-дырки на нулевом уровне Ландау зоны проводимости. Процесс идет без изменения внутренних степеней свободы триона. Конечным состоянием процесса излучательной рекомбинации является либо синглетное по дыркам состояние в σ^- -поляризации, либо триплетное — в σ^+ -поляризации (см. схемы на рис. 8). Различие в свойствах трионов в двух поляризациях проистекает из того факта, что в σ^- -поляризации спиновые квантовые числа одной из ферми-дырок и возбужденного электрона совпадают. Возбужденный электрон может занять состояние ферми-дырки, передавая избыточную энергию другому электрону, а это есть не что иное, как магнитоплазменные колебания в присутствии дополнительной ферми-дырки или плазмарон («PIn»). Триплетное по дыркам трехчастичное состояние в σ^+ -поляризации является трионом («T»). Электрон, входящий в трион, не может участвовать в плазменных колебаниях. Таким образом, несмотря на то, что темные триплетные циклотронные спин-флип-магнитоэкситоны не являются оптически активными, их наличие можно детектировать косвенным методом — через модификацию спектров ФЛ, отвечающих оптически активным каналам рекомбинации. Иными словами, оптические переходы с участием трехчастичных комплексов являются «индикаторами» появления в области зондирования триплетных спиновых магнитоэкситонов.

В экспериментах [40] в качестве источника возбуждения 2D ЭС использовался непрерывный одномодовый лазерный диод ($\lambda \approx 780$ нм), луч которого разделялся на два: накачивающий и зондирующий.

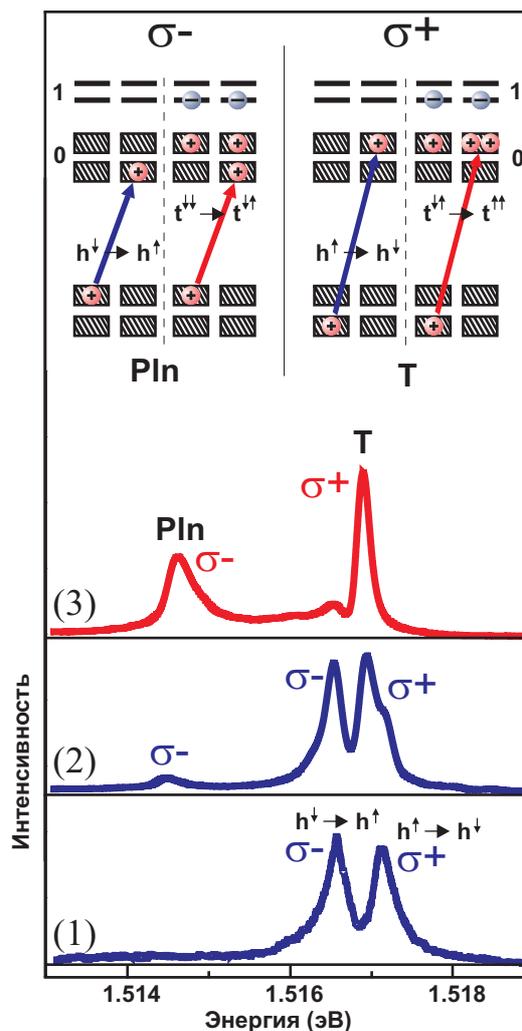


Рис. 8. Спектры ФЛ: импульсное фотовозбуждение, $\tau_p = 10$ мкс, $P_p = 100$ мкВт (1); непрерывное фотовозбуждение с двумя разнесенными пятнами накачки (2) и (3); $P_{probe} = 3$ мкВт, $P_{pump} = 0$ (2); $P_{probe} = 3$ мкВт, $P_{pump} = 150$ мкВт (3). Вверху — схема оптических переходов для двух направлений циркулярной поляризации

Оба луча фокусировались на поверхности исследуемого образца в два пятна диаметром около 20 мкм, разнесенных на расстояние около 200 мкм. Мощность накачки P_{pump} варьировалась в диапазоне от 2 до 200 мкВт, тогда как мощность зондирующего луча поддерживалась постоянной: $P_{probe} = 3$ мкВт. Темные СЦЭ создавались в пятне накачки, и их концентрацию можно было менять, варьируя P_{pump} . Приход этих СЦЭ в пятно зондирования проводился по изменению в этом месте спектров ФЛ. Спектр (2) на рис. 8 измерен в отсутствие накачки в пятне фотовозбуждения. В нем видны две линии, отвечающие одночастичным переходам, а также отно-

нительно слабые линии «PIn» и «Т», возникающие за счет присутствия в области зондирования небольшого количества СЦЭ, рождаемых самим пучком зондирования. При низком уровне накачки в пятне фотовозбуждения, $P_{pump} < 6$ мкВт, форма и интенсивность спектра ФЛ в пятне зондирования практически не изменялась. Таким образом, в данных условиях ансамбль СЦЭ, созданных в пятне фотовозбуждения, не оказывает практически никакого влияния на состояния в пятне зондирования. Однако с повышением интенсивности накачки в пятне возбуждения форма спектра излучения, измеренного в пятне зондирования, меняется. Линии, связанные с оптическими переходами в многочастичных комплексах (линии «PIn» и «Т»), растут по интенсивности и становятся доминирующими (спектр (3) на рис. 8). Таким образом, из результатов, представленных на рис. 8, однозначно следует, что по мере увеличения накачки темные СЦЭ из пятна фотовозбуждения приходят в область зондирования, преодолевая при этом макроскопически большое расстояние, около 200 мкм.

4.3. Кинетика растекания спиновых экситонов

Эксперименты по изучению кинетики растекания спиновых экситонов [41–43] проводились с помощью двухсветовой методики. В качестве источника фотовозбуждения использовался одномодовый лазерный диод ($\lambda \approx 780$ нм). Модулирование тока диода с помощью генератора прямоугольных импульсов позволяло измерять τ_d — время уменьшения сигнала ФРО из пятна фотовозбуждения после окончания импульса накачки. Увеличение длительности импульса накачки τ_p , либо пиковой мощности P_p приводило к возрастанию плотности СЦЭ, накачиваемых за один импульс. Период следования импульсов T_p выбирался таким, чтобы превысить все характерные переходные и релаксационные процессы в исследуемой системе, и составлял десятки миллисекунд. Следует отметить, что при этих измерениях нельзя определить, за счет чего убывает сигнал ФРО после окончания импульса накачки. Это может быть связано как с релаксацией неравновесных спин-флип-экситонов в основное состояние за время τ , так и с их уходом из пятна фотовозбуждения за время τ_{prop} . В том и другом случаях фиксируется уменьшение в пятне накачки/зондирования числа ферми-дырок, входящих в состав СЦЭ.

Результаты измерений времени убывания сигнала ФРО τ_d в зависимости от длительности импуль-

са накачки τ_p при фиксированной пиковой мощности P_p приведены на рис. 9. На кривой можно выделить три характерных участка. Первый соответствует низкому уровню фотовозбуждения системы: концентрация СЦЭ составляет менее 1% от плотности квантов магнитного потока. В этом случае время τ_d слабо зависит от длительности импульса фотовозбуждения, составляя около 600 мкс. На втором участке наблюдается рост τ_d приблизительно на 300 мкс, а на третьем — резкое падение.

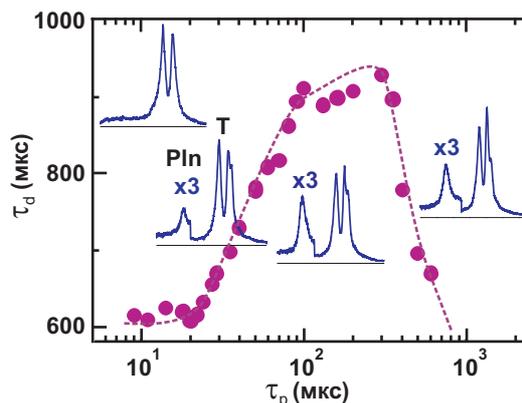


Рис. 9. Время спада сигнала ФРО как функция длительности импульса фотовозбуждения $\tau_d(\tau_p)$. На вставках — спектры ФЛ, измеренные при $\tau_p = 10, 30, 100$ и 1000 мкс

Недостатком метода ФРО является то обстоятельство, что регистрируется лишь общее количество фотовозбужденных ферми-дырок и неизвестно, какой обобщенный импульс имеют СЦЭ, в состав которых эти дырки входят. Функцию распределения спин-флип-экситонов по обобщенным импульсам оказывается возможным определить из спектров ФЛ трехчастичных экситонных комплексов в 2D ЭС. При этом, как уже упоминалось, энергия триона не несет информации об обобщенном импульсе входящего в него СЦЭ, а интенсивность линии «Т» учитывает, фактически, лишь полную концентрацию спин-флип-экситонов. В то же время спектр ФЛ плазмарона, напротив, несет информацию как о полном числе СЦЭ, так и о функции распределения плазмаронов по энергиям, из которой, в свою очередь, можно извлечь функцию распределения по обобщенным импульсам q входящих в плазмарон СЦЭ, которую они имели к моменту формирования плазмарона. Чтобы понять природу поведения спин-флип-экситонов в пятне фотовозбуждения в зависимости от накачиваемой экситонной плотности, были проведены одновременные измерения спектров ФЛ 2D ЭС [43].

На вставках рис. 9 видно, что в условиях малых плотностей фотовозбуждения число СЦЭ с большими обобщенными импульсами мало: линия плазмарона отсутствует. При увеличении экситонной плотности начинается процесс рассеяния рожденных светом СЦЭ с импульсами $q \approx 0$ в область минимума дисперсионной зависимости. В результате линия плазмарона с импульсами СЦЭ $q \approx 1/l_B$ растет быстрее, чем линия триона. Поскольку этот процесс начинается с некоторой критической длительности импульса накачки (т.е. с критической плотности СЦЭ), естественно предположить, что спин-флип-экситоны за время жизни не успевают термализоваться и заполнить энергетические состояния вблизи минимума дисперсионной зависимости. Это дает оценку снизу на время внутривалинной релаксации СЦЭ — не менее 600 мкс. Причина такой медленной внутривалинной релаксации состоит в невозможности одновременно удовлетворить законам сохранения энергии и импульса при испускании акустического фонона. Конкретные значения времени релаксации связаны с параметрами гетероструктуры.

Процесс рассеяния СЦЭ в низшее энергетическое состояние сопровождается появлением в спектрах ФЛ линии плазмарона, что сигнализирует о заполнении магнитоэкситонных состояний вблизи минимума дисперсионной зависимости. При этом время релаксации СЦЭ в основное состояние, измеренное с помощью ФРО, увеличивается (второй участок на зависимости $\tau_d(\tau_p)$, рис. 9). Это очевидный результат, так как в процессе релаксации в основное состояние спин-флип-экситоны должны, помимо энергии, отдать большой импульс $q \approx 1/l_B$. Наиболее интересным является поведение спектров ФЛ в режиме, когда СЦЭ начинают уходить из пятна возбуждения. В этом случае время τ_d , измеренное с помощью ФРО, резко уменьшается. Одновременно наблюдается дисбаланс в общем числе накачиваемых в пятно возбуждения СЦЭ, измеряемом с помощью интенсивности линии триона, и числе СЦЭ с обобщенным импульсом $q \approx 1/l_B$, измеряемом с помощью линии плазмарона. Общее число накачиваемых СЦЭ растет, а число СЦЭ с импульсами порядка обратной магнитной длины уменьшается. Очевидно, что из пятна возбуждения уходят не все фотовозбужденные спин-флип-экситоны, а только экситоны с обобщенным импульсом $q \approx 1/l_B$. Скорость, которую они приобретают при выходе из пятна накачки, можно грубо оценить как $v_c \approx d_{\text{путр}}/2\tau_{\text{ггор}}$. Минимальное зарегистрированное в экспериментах время спада сигнала ФРО со-

ставляло около 30 мкс [41, 42], так что оценка для максимальной скорости растекания дает значение, равное примерно 25 м/с.

Как было показано в предыдущем разделе, в экспериментах с пространственно-разнесенными пятнами накачки и зондирования при увеличении плотности мощности фотовозбуждения интенсивность линии плазмарона в удаленной области растет до тех пор, пока интегральная интенсивность линии плазмарона не приблизится к интегральной интенсивности линии триона. Это означает, что практически все спин-флип-экситоны, пришедшие в область регистрации из пятна возбуждения, имеют обобщенный импульс $q \approx 1/l_B$. Вычитая с соответствующим весом спектр ФЛ равновесной 2D ЭС из спектров ФЛ в удаленной области, можно получить распределение по обобщенным импульсам неравновесных магнитоэкситонов [43]. Из приведенных на рис. 10 функций распределения $n_{SCE}(q)$ в отсутствие и при наличии удаленного фотовозбуждения следует, что именно спин-флип-экситоны с импульсами порядка обратной магнитной длины принимают участие в магнитоэкситонном транспорте.

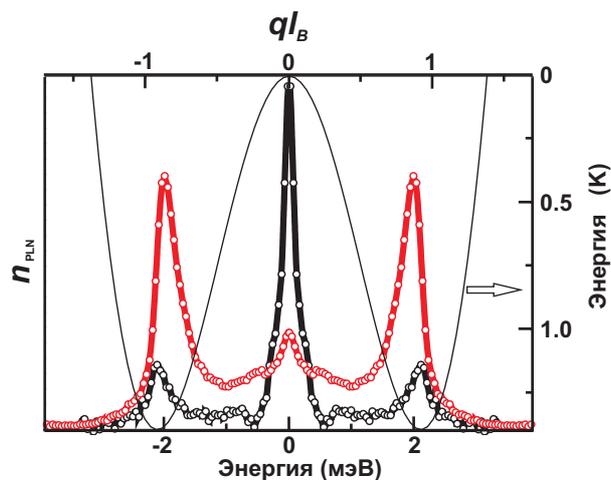


Рис. 10. Распределение плазмаронов по энергиям (нижняя шкала) и импульсам (верхняя шкала) для двух режимов непрерывного фотовозбуждения, соответствующих спектрам 2 (черная кривая) и 3 (красная кривая) на рис. 8. Тонкая линия — дисперсия триплетных магнитоэкситонов, рассчитанная в соответствии с результатами работы [3]

Из-за невозможности удовлетворить законам сохранения энергии и импульса одновременно в ансамбле неравновесных спин-флип-экситонов не происходит полной термализации. Релаксация в низшее энергетическое состояние протекает за счет двух-

экситонных процессов [44], которые становятся заметными по достижению неравновесным ансамблем магнитоэкситонов некоторой критической плотности. Вследствие сверхдлинных времен термализации ансамбль СЦЭ является существенно неравновесным. Одна его часть представляет собой газ магнитоэкситонов с обобщенными импульсами $q \approx 0$. Их доля определяется не только внешней температурой, но и динамикой фотовозбуждения, двухэкситонной внутридолинной релаксацией и транспортом спин-флип-экситонов из пятна возбуждения. Другая часть — это СЦЭ с импульсами $q \approx 1/l_B$, которые формируют магнитоэкситонный конденсат и участвуют в экситонном транспорте (переносе спина) на макроскопические расстояния.

4.4. Когерентность магнитоэкситонного конденсата

При исследовании пространственной когерентности магнитоэкситонного конденсата [45, 46] сравнивались интерферограммы в свете резонансного отражения для оптического перехода (0-0) между состояниями нулевых уровней Ландау тяжелых дырок валентной зоны и электронов зоны проводимости, полученные без оптической накачки и при включенной накачке. В идеальной 2D ЭС-системе в отсутствие фотовозбуждения сигнал резонансного отражения от квантово-холловского изолятора при $\nu = 2$ наблюдаться не должен: поглощение резонансного фотона и его последующее переизлучение (т. е. резонансное отражение) невозможно, пока на нулевом электронном уровне Ландау не появится ферми-дырка. В реальности скрещенные линейные поляризаторы не подавляют отражение полностью и какое-то небольшое количество света попадает в интерферометр. Включение накачки приводит к возникновению сигнала ФРО (отражение возрастает, по крайней мере, на порядок величины), что свидетельствует о появлении в 2D ЭС макроскопического числа неравновесных спин-флип-экситонов. Для формирования магнитоэкситонного конденсата необходимо, чтобы СЦЭ начали эффективно заполнять состояния вблизи минимума дисперсионной зависимости при $q_{min} \approx 1/l_B$. Максимальная интенсивность полосы плазмарона относительно линии триона служила критерием при подборе параметров эксперимента: напряженности магнитного поля B и мощности накачки P_{pump} . Выяснилось, что интенсивность линии «Pn» сравнивается с линией «T», а линия одночастичного перехода, наблюдаемая, как и плазмарон, в σ^- -поляризации, практически исче-

зает при интенсивности накачки не более 10 Вт/см² и факторе заполнения $\nu \gtrsim 2$. Спектр ФЛ с интенсивной линией плазмарона записывался непосредственно перед регистрацией интерферограммы и контролировался после. Профиль $|g^{(1)}(\delta) \cos \Phi(\delta)|$ в отсутствие фотовозбуждения приведен на рис. 11а, а при включенной накачке — на рис. 11б.

На рис. 11а синим цветом показана аппаратная функция, наилучшим образом описывающая центральный пик при $\delta = 0$. Здесь же приведен результат свертки аппаратной кривой и функции $\exp(-|x|/\xi)$ с параметром $\xi = 0.4$ мкм. Можно предположить, что высокая степень когерентности излучения зондирующего лазера при рассеянии на матовом стекле теряется не полностью. Во всяком случае, первый нуль функции $|2J_1(\nu)/\nu|$ в профиле полос явно не наблюдается и результат свертки ближе к эксперименту.

Ширины центральных пиков на рис. 11а и б различаются мало. Главное различие состоит в поведении $|g^{(1)}(\delta)|$ при больших сдвигах. Хотя в этой области δ воспроизводимость $|g^{(1)}(\delta)|$ от измерения к измерению оставляет желать лучшего, но само подрастание «крыльев» распределения $|g^{(1)}(\delta)|$ при включении накачки воспроизводится надежно. На рис. 11б приведен пример, когда этот эффект максимален. Зависимость $|g^{(1)}(\delta)|$, приведённую на рис. 11б, никакой сверткой $\exp(-|x|/\xi)$ с аппаратной функцией получить невозможно: при такой ширине центрального пика убывание коррелятора с расстоянием будет происходить гораздо быстрее. Качественно картина объясняется в предположении, что имеются два независимых источника излучения: некогерентный ($\xi \lesssim 0.1$ мкм) и частично когерентный с параметром $\xi \lesssim 10$ мкм (точнее определить здесь невозможно). Результат суммирования аппаратной функции и ее свертки с экспонентой $\exp(-|x|/\xi)$ при $\xi = 10$ мкм с весом соответственно 0.8 и 0.2 показан на рис. 11б зеленой кривой.

Зависимость $|g^{(1)}(\delta)|$ на рис. 11б очень похожа на ту, что впервые наблюдалась для внутриврезонаторных экситонных поляритонов в работе [34]. В том случае центральный пик хорошо описывался гауссианом, ширина которого напрямую связана с тепловой дебройлевской длиной волны λ_{dB} , достигавшей 5–6 мкм при высокой интенсивности оптической накачки. Масса СЦЭ гораздо больше ($m_{SCE} \approx 0.13m_e$), поэтому для него при $T = 0.5$ К величина $\lambda_{dB} \approx 0.3$ мкм. Поскольку разрешение используемой оптической системы не лучше 1 мкм, то в нашем случае именно оно определяет шири-

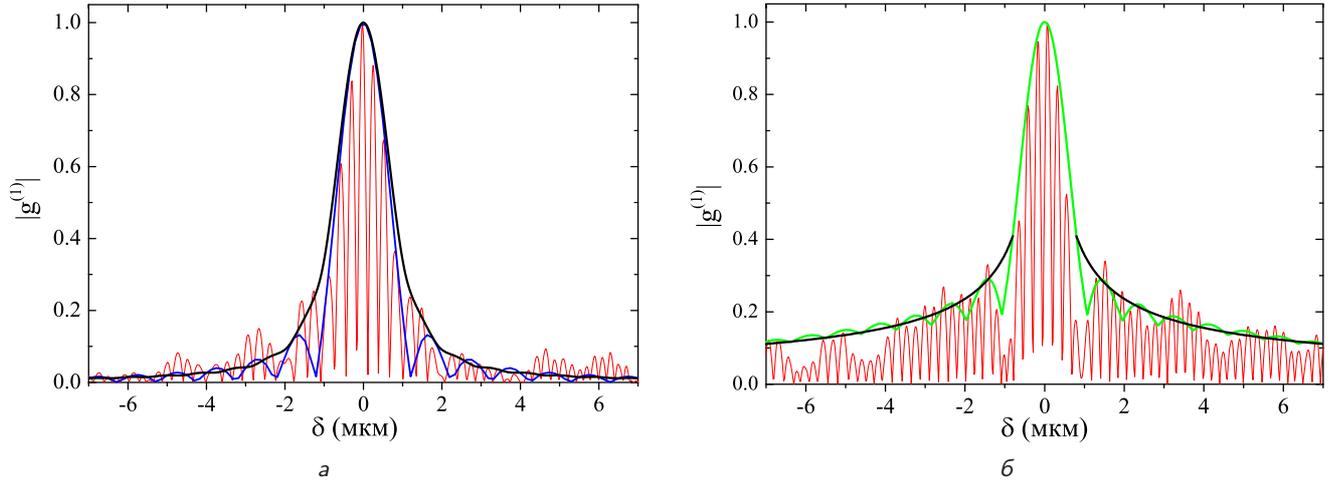


Рис. 11. Оценка степени когерентности магнитоэкситонного конденсата. Красная линия — профиль интерференционных полос в свете резонансного отражения $|g^{(1)}(\delta) \cos \Phi(\delta)|$. а) $P_{pump} = 0$, $P_{probe} = 5$ мкВт; синяя линия — аппаратная функция $|2J_1(\nu)/\nu|$, наилучшим образом описывающая центральный пик; черная линия — результат ее свертки с функцией $\exp(-|\delta|/\xi)$ при $\xi = 0.4$ мкм. б) $P_{pump} = P_{probe} = 1$ мкВт; зеленая кривая — результат суммирования с весом 0.8 и 0.2 соответственно аппаратной функции и ее свертки с $\exp(-|\delta|/\xi)$ при $\xi = 10$ мкм; черная кривая — функция $(0.18/|\delta|)^{0.6}$

ну пика при $\delta \simeq 0$. Описание поведения коррелятора на больших расстояниях степенной зависимостью вида $(b/|x|)^a$ продемонстрировано на рис. 11б черной кривой. Точность определения показателя невелика, но все же можно утверждать, что $a \simeq 0.5-0.7$. Согласно теории БКТ в конденсате 2D-бозонов значение показателя степени подчиняется условию $a \leq 1/4$ [12, 13]. В экспериментах [34], где точность измерений гораздо выше, были получены значения $a \simeq 0.9-1.2$. Последующие исследования показали, что быстрое убывание коррелятора $g^{(1)}$ с расстоянием связано с возбуждением одновременно нескольких пространственных мод [47]. Лишь при накачке лазерным пучком с гауссовым поперечным профилем, возбуждающим одну низшую по энергии моду, показатель степени совпадает с теоретическим вблизи порога возникновения БКТ-конденсата и становится еще меньше с ростом интенсивности фотовозбуждения [48].

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Магнитоэкситонный конденсат — это первый экспериментальный пример конденсации композитных бозонов не в обычном пространстве, как в случае электрон-дырочной жидкости в объемных полупроводниках [49], и не в обычном импульсном пространстве, как в случае атомных бозе-конденсатов [50], а в пространстве обобщенных импульсов — величин, зависящих как от пространственных координат, так и от их градиентов [51]. Магнитоэкси-

тонный конденсат формируется из темных циклотронных спин-флип-магнитоэкситонов с дипольным моментом порядка магнитной длины, умноженной на элементарный электронный заряд. Из-за невозможности удовлетворить законам сохранения энергии и импульса одновременно в ансамбле неравновесных спин-флип-экситонов не происходит полной термализации. Вследствие сверхдлинных времен термализации ансамбль спин-флип-экситонов является существенно неравновесным. Он состоит из газа магнитоэкситонов с обобщенными импульсами $q \approx 0$ (их доля определяется температурой, динамикой фотовозбуждения, внутридолинной релаксацией и транспортом магнитоэкситонов из пятна возбуждения) и конденсата магнитоэкситонов с импульсами $q \approx 1/l_B$, которые участвуют в быстром экситонном транспорте, сопровождающемся переносом спина, на макроскопические расстояния. Таким образом, фотовозбужденная система спин-флип-экситонов существенно отличается от системы непрямых в импульсном пространстве экситонов в объемных полупроводниках, таких как Ge и Si, где долгоживущие экситоны термализуются на масштабах их времен жизни [52]. Примером неравновесной бозе-системы, близкой к системе циклотронных спин-флип-магнитоэкситонов, следует рассматривать параметрически накачиваемые бозе-эйнштейновские конденсаты магнонов в пленках железо-иттриевого граната [20].

ЛИТЕРАТУРА

1. W. Kohn, Phys. Rev. **123**, 1242 (1961).
2. Ю. А. Бычков, С. В. Иорданский, Г. М. Элиашберг, Письма в ЖЭТФ **33**, 152 (1981).
3. C. Kallin and B. I. Halperin, Phys. Rev. B **30**, 5655 (1984).
4. L. V. Kulik, I. V. Kukushkin, S. Dickmann et al., Phys. Rev. B **72**, 073304 (2005).
5. S. Dickmann and I. V. Kukushkin, Phys. Rev. B **71**, 241310 (2005).
6. L. V. Kulik, A. V. Gorbunov, A. S. Zhuravlev et al., Sci. Rep. **5**, 10354 (2015).
7. S. M. Dickmann, Phys. Rev. Lett. **110**, 166801 (2013).
8. Л. В. Кулик, А. В. Горбунов, С. М. Дикман, В. Б. Тимофеев, УФН **189**, 925 (2019).
9. И. В. Лернер, Ю. Е. Лозовик, ЖЭТФ **80**, 1488 (1981).
10. P. C. Hohenberg, Phys. Rev. **158**, 383 (1967).
11. N. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).
12. В. Л. Березинский, ЖЭТФ **59**, 907 (1970); **61**, 1144 (1971).
13. J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, J. Phys. C **6**, 1181 (1973).
14. D. J. Bishop and J. D. Reppy, Phys. Rev. Lett. **40**, 1727 (1978); Phys. Rev. B **22**, 5171 (1980).
15. H. S. J. van der Zant, H. A. Rijken, and J. E. Mooij, J. Low Temp. Phys. **82**, 67 (1991).
16. Z. Hadzibabic, P. Krüger, M. Cheneau et al., Nature **441**, 1118 (2006).
17. P. Cladé, C. Ryu, A. Ramanathan et al., Phys. Rev. Lett. **102**, 170401 (2009).
18. G. Roumpos, M. D. Fraser, A. Löffler et al., Nature Phys. **7**, 129 (2011).
19. J. Kasprzak, M. Richard, S. Kundermann et al., Nature **443**, 409 (2006).
20. S. O. Demokritov, V. E. Demidov, O. Dzyapko et al., Nature **443**, 430 (2006).
21. M. H. Anderson, J. R. Ensher, M. R. Matthews et al., Science **269**, 198 (1995).
22. K. B. Davis, M.-O. Mewes, M. R. Andrews et al., Phys. Rev. Lett. **75**, 3969 (1995).
23. С. А. Москаленко, М. А. Либерман, Е. С. Москаленко и др., ФТТ **55**, 1457 (2013).
24. Ю. Е. Лозовик, В. И. Юдсон, ЖЭТФ **71**, 738 (1976).
25. В. Б. Тимофеев, А. В. Горбунов, Д. А. Демин, ФНТ **37**, 229 (2011).
26. А. В. Горбунов, В. Б. Тимофеев, Письма в ЖЭТФ **96**, 145 (2012).
27. D. D. Osheroff, R. C. Richardson, and D. M. Lee, Phys. Rev. Lett. **28**, 885 (1972).
28. J. P. Eisenstein and A. H. MacDonald, Nature **432**, 691 (2004).
29. C. A. Regal, M. Greiner, and D. S. Jin, Phys. Rev. Lett. **92**, 040403 (2004).
30. A. S. Zhuravlev, S. Dickmann, L. V. Kulik, and I. V. Kukushkin, Phys. Rev. B **89**, 161301(R) (2014).
31. A. S. Zhuravlev, V. A. Kuznetsov, L. V. Kulik et al., Phys. Rev. Lett. **117**, 196802 (2016).
32. V. A. Kuznetsov, L. V. Kulik, M. D. Velikanov et al., Phys. Rev. B. **98**, 205303 (2018).
33. М. Борн, Э. Вольф, *Основы оптики*, Наука, Москва (1973).
34. G. Roumpos, M. Lohse, W. H. Nitsche et al., Proc. Nat. Ac. Sci. **109**, 6467 (2012).
35. L. V. Kulik, S. M. Dickmann, I. K. Drozdov et al., Phys. Rev. B **79**, 121310 (2009).
36. L. V. Kulik, A. S. Zhuravlev, S. M. Dickmann et al., Nature Comm. **7**, 13499 (2016).
37. S. Dickmann, JETP Lett. **109**, 63 (2019).
38. S. Dickmann, Lith. J. Phys. **59**, 79 (2019).
39. L. V. Kulik, V. A. Kuznetsov, A. S. Zhuravlev et al., Sci. Rep. **8**, 10948 (2018).
40. А. В. Горбунов, Л. В. Кулик, В. А. Кузнецов и др., Письма в ЖЭТФ **106**, 651 (2017).
41. L. V. Kulik, A. V. Gorbunov, A. S. Zhuravlev et al., Appl. Phys. Lett. **114**, 062403 (2019).
42. A. V. Gorbunov, V. A. Kuznetsov, A. S. Zhuravlev et al., Ann. der Phys. **531**, 1800443 (2019).
43. А. С. Журавлев, В. А. Кузнецов, А. В. Горбунов и др., Письма в ЖЭТФ **110**, 260 (2019).
44. S. Dickmann and B. D. Kaysin, JETP Lett. **114**, 585 (2021).
45. А. В. Горбунов, А. В. Ларионов, Л. В. Кулик, В. Б. Тимофеев, Письма в ЖЭТФ **114**, 479 (2021).
46. А. В. Горбунов, В. Б. Тимофеев, Изв. РАН, сер. физ. **86**, 467 (2022).
47. W. H. Nitsche, N. Y. Kim, G. Roumpos et al., Phys. Rev. A **93**, 053622 (2016).
48. W. H. Nitsche, N. Y. Kim, G. Roumpos et al., Phys. Rev. B **90**, 205430 (2014).
49. L.V. Keldysh, Contemp. Phys. **27**, 395 (1986).
50. J. R. Anglin and W. Ketterle, Nature **416**, 211 (2002).
51. J. E. Avron, I. W. Herbst, and B. Simon, Ann. Phys. **114**, 431 (1978).
52. И. В. Кукушкин, В. Д. Кулаковский, В. Б. Тимофеев, Письма в ЖЭТФ **34**, 36 (1981).

АДИАБАТИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКИХ КОМПЛЕКСОВ $\text{Cu}^{2+}\text{F}_8^-$ В КРИСТАЛЛЕ ФЛЮОРИТА

М. Н. Сарычев^a, У. А. Л. Хоссени^{a,b*}, И. В. Жевстовских^{a,c}, В. А. Уланов^{d,e},
А. В. Егранов^{f,g}, В. Т. Суриков^h, Н. С. Аверкиевⁱ, В. В. Гудков^{a,**}

^a Уральский федеральный университет, 620002, Екатеринбург, Россия

^b Department of Physics, Faculty of Science, Benha University, 13511, Benha, Egypt

^c Институт физики металлов им. М. Н. Михеева
Уральского отделения Российской академии наук,
620137, Екатеринбург, Россия

^d Казанский государственный энергетический университет, 420066, Казань, Россия

^e Казанский физико-технический институт им. Е. К. Завойского
ФИЦ «Казанский научный центр Российской академии наук»,
420029, Казань, Россия

^f Институт геохимии им. А. П. Виноградова
Сибирского отделения Российской академии наук,
664033, Иркутск, Россия

^g Иркутский государственный университет, 664003, Иркутск, Россия

^h Институт химии твердого тела
Уральского отделения Российской академии наук,
620990, Екатеринбург, Россия

ⁱ Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021, Санкт Петербург, Россия

Поступила в редакцию 2 июня 2022 г.,

после переработки 2 июня 2022 г.

Принята к публикации 6 июня 2022 г.

Представлены результаты ультразвуковых исследований в монокристалле флюорита CaF_2 с изовалентным замещением ионов кальция Ca^{2+} ионами меди, выполненных на частотах 23–163 МГц в интервале температур 4–240 К. На температурных зависимостях поглощения и скорости продольных и поперечных нормальных мод, связанных с модулями упругости $c_L = c_{44} + (c_{11} + c_{12})/2$ и $c_E = (c_{11} - c_{12})/2$, при температурах ниже 80 К были обнаружены аномалии, типичные для релаксационных вкладов систем ян-теллеровских комплексов. Ионы Cu^{2+} в кубическом окружении в основном состоянии обладают трехкратным орбитальным вырождением, описываются $T \otimes (e + t_2)$ -задачей эффекта Яна–Теллера и имеют адиабатический потенциал, заданный в пятимерном пространстве тригональных и тетрагональных симметризованных координат. Анализ экспериментальных данных позволил определить симметричные свойства экстремумов (глобальных минимумов и седловых точек) нижнего листа адиабатического потенциала, найти значения входящих в вибронный гамильтониан линейных (тетрагональной и тригональной) и квадратичной констант вибронной связи ян-теллеровских комплексов $\text{Cu}^{2+}\text{F}_8^-$ в матрице CaF_2 , энергий ян-теллеровской стабилизации и координат этих экстремумов в пятимерном пространстве нормальных координат.

Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 95-летию Э. И. Раиба

DOI: 10.31857/S004445102210008X

EDN: ENOJHV

1. ВВЕДЕНИЕ

Кристаллы, легированные $3d$ -ионами, находят широкое применение в таких приложениях науки и техники, как твердотельные лазерные и нелинейные оптические материалы, материалы для преобразования инфракрасного излучения в видимое,

* W. A. L. Hosseny

** E-mail: v.v.gudkov@urfu.ru

для хранения информации и др. [1]. В основе этих приложений лежат оптические переходы между основным электронным состоянием и возбужденными состояниями примеси. В случае орбитального вырождения энергетические состояния примесного иона определяются с учетом не только кристаллического поля, но и электрон-вибронного взаимодействия, т. е. эффекта Яна–Теллера (ЯТ) [2–4]. Наиболее важные взаимодействия, проявляющиеся, например, в оптических спектрах поглощения и излучения, происходят в ближайшей координационной сфере. Объектом исследования становится комплекс, содержащий примесный ион и ближайшее окружение.

Традиционными методами исследования кристаллов, легированных $3d$ -примесями, являются оптические и магниторезонансные [5, 6]. Ультразвуковые методы, широко применяемые в физике твердого тела [7–9], являются менее распространенными при изучении эффекта ЯТ, несмотря на то, что первые эксперименты в этой области были выполнены в 60-х годах прошлого столетия (см. обзор [3]). К достижениям работ того периода следует отнести то, что надежно были установлены релаксационная природа [10] аномалий поглощения и дисперсии ультразвука, связанных с проявлением эффекта ЯТ [11], и предложены механизмы релаксации [12]. В более поздних работах, выполненных уже в 2000-х годах [13–18], было показано, что методы физической акустики позволяют получать новую информацию об основном состоянии ЯТ-комплекса, в частности, определять симметричные свойства экстремумов (глобальных минимумов и седловых точек) адиабатического потенциала (АП), значения констант вибронной связи, входящих в вибронный гамильтониан, энергий ЯТ, стабилизации и координат экстремумов АП, заданного в системе симметризованных координат (см., например, работу [13] и ссылки в ней).

Накопленная в этой области информация является довольно обширной, однако есть нерешенные проблемы, к одной из которых можно отнести следующую. При изучении ЯТ-комплексов, сформированных ионом Cr^{2+} в кристаллах ZnSe (II–VI, сфалерит [14]) и CdSe (II–VI, вюрцит [13]), глобальные минимумы АП имеют тетрагональную симметрию, а в кристаллах со структурой флюорита (SrF_2 [15] и CaF_2 [16, 17]) симметрия глобальных минимумов АП орторомбическая. В первом случае ЯТ-комплексы описываются в линейном по деформациям вибронном гамильтониане, а второй случай требует квадратичного приближения. При этом

в матрицах ZnSe и CdSe ЯТ-комплексы тетраэдрические, а во флюоритах — кубические. Ион Cr^{2+} в основном состоянии в обоих окружениях имеет одинаковый терм ${}^5T_2(t_2^2e^2)$ (см. табл. 1 в [3]), и с точки зрения описания эффекта ЯТ это идентичные случаи. Возникает вопрос, все ли ионы с трехкратным орбитальным вырождением в матрице со структурой флюорита формируют орторомбически искаженные ЯТ-комплексы?

Следует отметить, что симметричные свойства глобальных минимумов могут быть определены и с помощью ЭПР-исследований. И данные, полученные методами физической акустики, насколько нам известно, еще ни разу не вошли в противоречие с данными ЭПР. Однако для установления причинно-следственных связей желательнее иметь полный набор параметров, характеризующих ЯТ-подсистему. Его можно получить из ультразвуковых экспериментов, например, конкретизировать задачу эффекта ЯТ. Известно, что тетрагональные минимумы АП могут быть в случае как $T \otimes e$ -, так и $T \otimes (e + t_2)$ -задачи эффекта ЯТ. Проявление аномалий релаксационной природы только в тетрагональном упругом модуле позволяет рассматривать $T \otimes e$ -задачу эффекта ЯТ, в то время как наблюдение аномалий как в тетрагональном, так и в тригональном упругих модулях связано с проявлением уже $T \otimes (e + t_2)$ -задачи эффекта ЯТ. В первом случае АП представляет собой три независимых параболоида, во втором — односвязную поверхность, заданную в системе пяти симметризованных координат, и содержит не только минимумы, но и седловые точки.

Параметры глобальных минимумов и седловых точек также можно определить из ультразвукового эксперимента. Кроме того, появляется возможность исследовать динамические свойства ЯТ-подсистемы: времена и механизмы релаксации, в том числе туннельные. Следует подчеркнуть, что эта информация недоступна другим экспериментальным методикам. В ультразвуковом эксперименте проявляются времена релаксации ЯТ-деформаций. Они связаны с перекрытием волновых функций в соседних минимумах АП. В ЭПР-экспериментах изучается динамика магнитной подсистемы: времена спин-решеточной релаксации или спиновой дефазировки.

В настоящей работе приведены результаты ультразвуковых исследований монокристалла флюорита, легированного ионами Cu^{2+} малой концентрации. Обнаружено аномальное поведение в температурных зависимостях поглощения и скорости про-

дольных и поперечных ультразвуковых волн, свидетельствующее о проявлении эффекта ЯТ, определены параметры, характеризующие АП и релаксацию ЯТ-центров, проведено сравнение этих параметров с данными для других ЯТ-центров в кристаллах со структурой флюорита, а именно, для Cr^{2+} [15, 17] и Ni^{2+} [18].

2. АДИАБАТИЧЕСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКОГО КОМПЛЕКСА

ЯТ-комплексы в кристаллах, содержащих примеси, можно описать, учитывая их вклад в свободную энергию или любой другой термодинамический потенциал. При малых концентрациях примеси эти комплексы считаются невзаимодействующими между собой, что позволяет использовать молекулярную модель. В рамках этой модели комплекс рассматривается как состоящий из ЯТ-иона и его ближайшего окружения. При более точном описании учитываются и следующие координационные сферы. Адиабатическое приближение предполагает различие инерциальных свойств электронов и ядер и наличие равновесного электронного распределения в любой мгновенной ядерной конфигурации. Описание электрон-ядерной системы основано на решении уравнения Шредингера с гамильтонианом [4] вида

$$H = H_r + H_Q + V(r, Q), \quad (1)$$

где H_r включает в себя кинетическую энергию электронов и электрон-электронное взаимодействие, H_Q — кинетическая энергия ядер, $V(r, Q)$ — энергия взаимодействия электронов и ядер между собой, r и Q обозначают наборы соответственно электронных и ядерных координат. Оператор $V(r, Q)$ представляется в виде разложения по ядерным смещениям относительно положения, соответствующего исходно равновесному комплексу с $Q_\alpha = Q_{\alpha 0} = 0$. Полная волновая функция $\Psi(r, Q)$ записывается в виде разложения по электронным функциям $\varphi_k(r)$ следующим образом:

$$\Psi(r, Q) = \sum_k \chi_k(Q) \varphi_k(r). \quad (2)$$

Решение уравнение Шредингера приводит к системе связанных уравнений с коэффициентами разложения $\chi_k(Q)$:

$$[H_Q - \epsilon_k(Q) - E] \chi_k(Q) + \sum_{m \neq k} W_{k,m}(Q) \chi_m(Q) = 0, \quad (3)$$

где E — полная энергия, $W_{k,m}(Q)$ — электронные матричные элементы вибронной связи (часть электрон-ядерного взаимодействия $V(r, Q)$):

$$W(Q) = V(r, Q) - V(r, 0) = \sum_\alpha \left(\frac{\partial V}{\partial Q_\alpha} \right)_0 Q_\alpha + \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \left(\frac{\partial^2 V}{\partial Q_\alpha \partial Q_\beta} \right)_0 Q_\alpha Q_\beta + \dots, \quad (4)$$

которые входят в адиабатический потенциал

$$\epsilon_k(Q) = \epsilon'_k(Q) + W_{kk}(Q), \quad (5)$$

т. е. потенциальную энергию ядер в усредненном поле электронов в состоянии $\varphi_k(r)$, ϵ'_k — упругая энергия комплекса без учета вибронной связи.

В случае трехкратного орбитального вырождения АП определяется пятью симметризованными координатами: тетрагональными Q_ϑ, Q_ϵ и тригональными Q_ξ, Q_η, Q_ζ . Линейные константы вибронной связи входят в выражения для энергий ЯТ-стабилизации (экстремумов АП) [4]:

$$E_E^{JT} = \frac{F_E^2}{2K_E}, \quad (6)$$

где E_E^{JT} — энергия ЯТ-стабилизации, соответствующая экстремумам тетрагональной симметрии, K_E — тетрагональная первичная силовая константа (характеризующая упругую энергию ЯТ-комплекса без учета вибронного взаимодействия), F_E — тетрагональная линейная константа вибронной связи:

$$F_E = \left\langle \vartheta \left| \left(\frac{\partial V}{\partial Q_\vartheta} \right)_0 \right| \vartheta \right\rangle. \quad (7)$$

Энергия ЯТ-стабилизации E_T^{JT} , соответствующая экстремумам тригональной симметрии, определяется тригональной линейной константой вибронной связи F_T и тригональной первичной силовой константой K_T :

$$E_T^{JT} = \frac{2}{3} \frac{F_T^2}{K_T}, \quad (8)$$

$$F_T = \left\langle \eta \left| \left(\frac{\partial V}{\partial Q_\eta} \right)_0 \right| \eta \right\rangle. \quad (9)$$

3. ВКЛАД ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКОЙ ПОДСИСТЕМЫ В МОДУЛИ УПРУГОСТИ

При проведении ультразвуковых исследований с помощью фазочувствительной установки измеряются изменения от внешнего параметра (температуры, магнитного поля) амплитуды и фазы сигнала, прошедшего через образец, из которых определяются изменения поглощения $\Delta\alpha$ и фазовой скорости Δv волны. Однако если экспериментальные данные сравниваются с теоретическими расчетами, то обсуждение удобнее вести в терминах динамических (зависящих от частоты) комплексных модулей упругости c . Заранее ограничиваем себя уравнениями движения в виде линейных дифференциальных уравнений второго порядка, решениями которых являются плоские волны малой амплитуды. Если пространственную и временную зависимости этих решений записать в виде $\exp[i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})]$ и при этом комплексный волновой вектор определить как $\mathbf{k} = (\omega/v - i\alpha)\mathbf{e}_k$, то

$$\frac{\Delta c}{c_0} = 2\left(\frac{\Delta v}{v_0} + i\frac{\Delta\alpha}{k_0}\right), \quad (10)$$

где $k_0 = \omega/v_0$, ω — циклическая частота волны, $v_0 = v(T_0)$, $\Delta v = v(T) - v_0$, $\Delta c = c(T) - c_0$, $c_0 = c(T_0)$, $\Delta\alpha = \alpha(T) - \alpha_0$, $\alpha_0 = \alpha(T_0)$, T_0 — некоторое фиксированное значение температуры.

Переход к описанию экспериментальных данных в терминах динамических модулей упругости обусловлен следующими обстоятельствами.

1) Модули упругости, как и другие материальные тензоры, подчиняются соотношениям типа Крамера–Кронига, что дает дополнительные возможности при интерпретации данных (общую связь между поглощением и дисперсией звуковых волн рассматривал Гинзбург [19]).

2) Физические величины (действительные и мнимые компоненты модулей упругости), характеризующие дисперсию и диссипацию энергии волны, представляются в одних и тех же единицах и могут быть наглядно показаны кривыми в общей системе координат.

3) Проявление эффекта ЯТ в ультразвуковом эксперименте описывается вкладом ЯТ-подсистемы в плотность свободной энергии, из которой путем дифференцирования по компонентам относительных деформаций получается выражение для изотермического вклада в модули упругости, содержащее линейные константы вибронной связи.

4) Выражение для относительного вклада ЯТ-подсистемы c_{ij}^{JT}/c_0 в компоненты динамического модуля упругости содержит зависимость от частоты только через параметр временной (частотной) дисперсии $\omega\tau$ (τ — время релаксации неравновесной добавки функции распределения ЯТ-подсистемы):

$$\frac{c_{ij}^{JT}}{c_0} = \frac{(c_{ij}^{JT})^T}{c_0} \frac{1 - i\omega\tau}{1 + (\omega\tau)^2}, \quad (11)$$

где $(c_{ij}^{JT})^T$ — изотермический вклад ЯТ-подсистемы в модуль упругости кристалла. Здесь и далее используются обозначения Фогта для тензорных компонент (см., например, стр. 30 в [8]).

Выражение для изотермического вклада в модуль упругости определяется производной от плотности свободной энергии (см., например, § 10 в [20]):

$$(c_{ij})^T = \left(\frac{\partial^2 \mathcal{F}}{\partial \varepsilon_i \partial \varepsilon_j}\right)_{\varepsilon \rightarrow 0}, \quad (12)$$

где ε_i — компоненты тензора деформаций. Вклад ЯТ-подсистемы \mathcal{F}^{JT} определяется статистической суммой Z (см., например, § 31 в [21]):

$$\mathcal{F}^{JT} = -nk_B T \ln Z, \quad (13)$$

$$Z = \sum_{i=1}^m \exp\left(-\frac{\Delta E_i^S}{k_B T}\right), \quad (14)$$

где n — концентрация ЯТ-комплексов, k_B — постоянная Больцмана, индекс «S» указывает симметричные свойства глобальных минимумов (тетрагональных E , тригональных T или орторомбических OR), $m = 3, 4, 6$ — число минимумов для случаев симметрии соответственно E, T, OR :

$$(c_{ij}^{JT})^T = -nk_B T \left(\frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \varepsilon_i \partial \varepsilon_j}\right)_{\varepsilon \rightarrow 0}. \quad (15)$$

Выражения для ΔE_i^S для ЯТ-комплекса в случае кристалла со структурой флюорита были полу-

чены в [22]:

$$\Delta E_1^E = F_E a \varepsilon_1, \quad (16)$$

$$\Delta E_2^E = F_E a \varepsilon_2, \quad (17)$$

$$\Delta E_3^E = F_E a \varepsilon_3, \quad (18)$$

$$\Delta E_1^T = \frac{2aF_T}{3} (\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3 + \varepsilon_4 + \varepsilon_5 + \varepsilon_6), \quad (19)$$

$$\Delta E_2^T = \frac{2aF_T}{3} (\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3 - \varepsilon_4 - \varepsilon_5 + \varepsilon_6), \quad (20)$$

$$\Delta E_3^T = \frac{2aF_T}{3} (\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3 - \varepsilon_4 + \varepsilon_5 - \varepsilon_6), \quad (21)$$

$$\Delta E_4^T = \frac{2aF_T}{3} (\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3 + \varepsilon_4 - \varepsilon_5 - \varepsilon_6), \quad (22)$$

$$\Delta E_1^{OR} = -\frac{1}{4} F_E a \varepsilon_1 + aF_T (\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3 + \varepsilon_6), \quad (23)$$

$$\Delta E_2^{OR} = -\frac{1}{4} F_E a \varepsilon_1 + aF_T (\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3 - \varepsilon_6), \quad (24)$$

$$\Delta E_3^{OR} = -\frac{1}{4} F_E a \varepsilon_2 + aF_T (\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3 + \varepsilon_5), \quad (25)$$

$$\Delta E_4^{OR} = -\frac{1}{4} F_E a \varepsilon_2 + aF_T (\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3 - \varepsilon_5), \quad (26)$$

$$\Delta E_5^{OR} = -\frac{1}{4} F_E a \varepsilon_3 + aF_T (\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3 + \varepsilon_4), \quad (27)$$

$$\Delta E_6^{OR} = -\frac{1}{4} F_E a \varepsilon_3 + aF_T (\varepsilon_1 + \varepsilon_2 + \varepsilon_3 - \varepsilon_4), \quad (28)$$

где a — ребро кубического ЯТ-комплекса $\text{Cu}^{2+}\text{F}_8^-$. Изотермические вклады в модули, полученные с использованием уравнений (16)–(28), приведены в табл. 1.

В ходе экспериментов измеряются температурные зависимости поглощения и скорости ультразвуковых волн, которые можно, используя уравнение (10), пересчитать в температурные зависимости мнимых и действительных составляющих динамических модулей упругости. Важно помнить, что в данном случае речь идет о физических величинах, характеризующих кристалл в целом. ЯТ-подсистема вносит аддитивный вклад в плотность свободной энергии, а значит, и в модули упругости, поглощение и фазовую скорость. Этот вклад (уравнение (11)) необходимо выделить, потому что именно он описывается выражением, содержащим изотермические модули, приведенные в табл. 1 и зависящие от линейных констант вибронной связи F_E , F_T и параметра временной дисперсии $\omega\tau$.

Представим интересующую нас тензорную компоненту динамического модуля в виде суммы ЯТ-вклада и фонового модуля:

$$c_{ij} = c_{ij}^{JT} + c_{ij}^b. \quad (29)$$

Очевидно, что в примесном кристалле $\text{Re } c_{ij}^b \gg \text{Re } |c_{ij}^{JT}|$. Что касается $\text{Im } c_{ij}^b$, то при

низких температурах здесь ситуация может быть обратной: фоновое поглощение может быть пренебрежимо мало, а поглощение, обусловленное ЯТ-подсистемой, может иметь конечную величину. В связи с этим, относительно $\text{Im } c_{ij}^{JT}$ возможны два подхода. Первый предполагает уменьшение с температурой скорости релаксации более быстрое, чем линейное. Это приводит к нулевому поглощению при температуре, стремящейся к нулю, а значит, при низких температурах ЯТ-вклад в поглощение можно представить как

$$\alpha^{JT} = \alpha(T) - \alpha(T \rightarrow 0).$$

Это же самое допустимо, когда потенциальные барьеры (седловые точки) достаточно высоки и туннельный механизм релаксации хоть и вносит вклад в поглощение, но он мал, и имеет смысл его учитывать, если мы интересуемся только низкотемпературными механизмами релаксации. Признаком высоких потенциальных барьеров δ может служить положение пика релаксационного поглощения. Например, в $\text{CaF}_2 : \text{Ni}^{2+}$ пик поглощения при частоте 54 МГц наблюдается при довольно высоких температурах, около 60 К, что дает значение барьера $\delta = E_{OR}^{JT} - E_T^{JT} = 410 \text{ см}^{-1}$ [18]. Именно такой подход использовался в большинстве работ.

Однако эксперименты в $\text{CaF}_2 : \text{Cr}^{2+}$ [23] показали, что в этом кристалле пик поглощения на частоте 54 МГц наблюдается при более низкой температуре ($T \approx 8 \text{ К}$) и его форма хорошо моделируется тремя механизмами релаксации, рассмотренными еще в [3]. Самый низкотемпературный механизм (туннельный) характеризуется скоростью релаксации, линейной по температуре ($\tau_t^{-1} = B_t T$), что с учетом обратно пропорциональной зависимости изотермического модуля от температуры приводит к тому, что при низких температурах ЯТ-вклад в поглощение (и $\text{Im } c_{ij}^{JT}$) асимптотически стремится к постоянной величине, а вклад в фазовую скорость (и $\text{Re } c_{ij}^{JT}$) линейно зависит от температуры, стремясь к нулю при $T \rightarrow 0$. Способ нахождения низкотемпературного значения $\alpha^{JT}(T \rightarrow 0)$ также был предложен в работе [23] и использован позднее в [16]. Он состоит в моделировании зависимости $\text{Im}[\Delta c_{ij}(T)]$ с помощью трех механизмов релаксации с последующей подгонкой параметров. В этом заключается второй подход.

4. ЭКСПЕРИМЕНТ

Кристаллы $\text{CaF}_2 : \text{Cu}^{2+}$ были выращены в Физико-техническом институте им. Е. К. Завойско-

Таблица 1. Изотермические вклады ЯТ-подсистемы в модули упругости кристалла со структурой флюорита для глобальных минимумов АП симметрии S ($a_0 = a\sqrt{3}/2$ — расстояние между ионами F^- и Ca^{2+})

S	$(c_{11}^{JT})^T$	$(c_{12}^{JT})^T$	$(c_{44}^{JT})^T$	$(c_E^{JT})^T$	$(c_L^{JT})^T$
E	$-\frac{8}{27} \frac{na_0^2 F_E^2}{k_B T}$	$\frac{4}{27} \frac{na_0^2 F_E^2}{k_B T}$	0	$-\frac{2}{9} \frac{na_0^2 F_E^2}{k_B T}$	$-\frac{2}{27} \frac{na_0^2 F_E^2}{k_B T}$
T	0	0	$-\frac{16}{27} \frac{na_0^2 F_T^2}{k_B T}$	0	$-\frac{16}{27} \frac{na_0^2 F_T^2}{k_B T}$
OR	$-\frac{1}{54} \frac{na_0^2 F_E^2}{k_B T}$	$\frac{1}{108} \frac{na_0^2 F_E^2}{k_B T}$	$-\frac{4}{9} \frac{na_0^2 F_T^2}{k_B T}$	$-\frac{1}{72} \frac{na_0^2 F_E^2}{k_B T}$	$-\frac{na_0^2}{k_B T} \left(\frac{4}{9} F_T^2 + \frac{1}{216} F_E^2 \right)$

го КазНЦ РАН методом Чохральского, детали которого изложены в работе [24]. Номинально чистые кристаллы CaF_2 были изготовлены методом Бриджмена – Стокбаргера в Институте геохимии им. А. П. Виноградова СО РАН. Анализ состава исследуемых кристаллов выполнялся с помощью ELAN 9000 ICPMS (Perkin-Elmer SCIEX). Концентрация примеси меди составляла $n = (7.12 \pm 0.03) \cdot 10^{19} \text{ см}^{-3}$.

В кристаллах со структурой флюорита (пространственная группа $Fm\bar{3}m$) $3d$ -ионы изовалентно замещают катионы Ca^{2+} , формируя кубические

ЯТ-комплексы (рис. 1), при этом изовалентное замещение ионами Cu приводит к трехкратно вырожденным ЯТ-центрам с термом ${}^2T_{2g}(e_g^4 t_{2g}^5)$ (см., например, табл. 1 в [3]). На основании данных ЭПР установлено, что при концентрации ионов меди не более 0.5 ат. % (исследуемый нами кристалл попадает в эту категорию) образуются в основном орторомбические центры [24], хотя известно, что ионы Cu^{2+} в кристаллах со структурой флюорита могут образовывать и офф-центры [25, 26].

Ультразвуковые измерения проводились в Физико-технологическом институте УрФУ на установке, работающей по принципу перестраиваемого по частоте высокочастотного моста. Для генерации и регистрации ультразвуковых колебаний использовались резонансные пьезопреобразователи, изготовленные из ниобата лития. Погрешности измерений изменений поглощения и фазовой скорости составляли соответственно 0.1 дБ и 10^{-5} .

Были исследованы продольный $c_L = (c_{11} + c_{12} + 2c_{44})/2$ и тетрагональный $c_E = (c_{11} - c_{12})/2$ модули упругости. Модули c_L и c_E связаны с нормальными модами, распространяющимися вдоль кристаллографической оси $[110]$: соответственно продольной и поперечной, поляризованной вдоль оси $[1\bar{1}0]$. Примеры температурных зависимостей мнимых и действительных составляющих динамических модулей упругости, построенных на основе экспериментальных данных о поглощении и скорости исследованных мод с использованием уравнения (10), приведены на рис. 2 и 3. Видно, что аномалии релаксационной природы проявляются в обоих модулях упругости, c_E и c_L (при этом изменения в c_L почти на порядок больше, чем в c_E), что в соответствии с данными табл. 1 означает, что глобальные минимумы АП в ЯТ-комплексах CaF_2Cu^{2+} обладают орторомбической симметрией, как и в кристаллах $CaF_2 : Cr^{2+}$ и $CaF_2 : Ni^{2+}$.

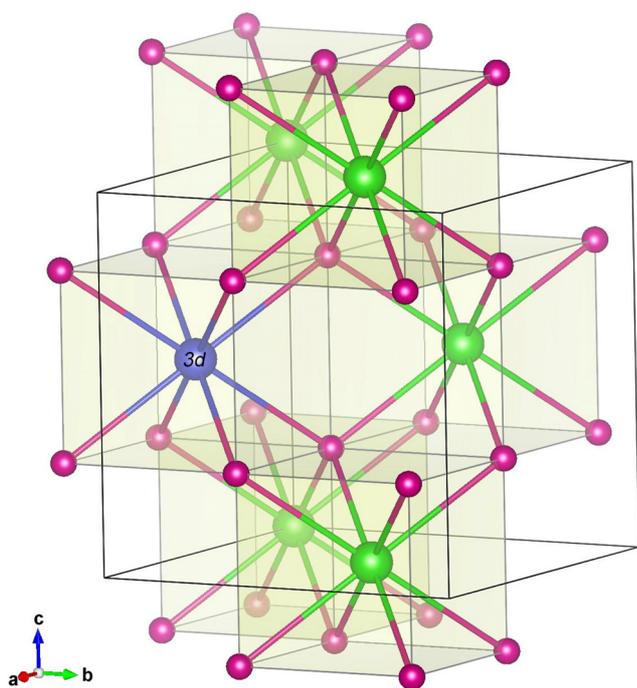


Рис. 1. (В цвете онлайн) Структура кристалла флюорита: $3d$ -ион (в данной работе Cu^{2+}) изовалентно замещает Ca^{2+} и, находясь в окружении восьми ионов фтора, формирует кубический ЯТ-комплекс

5. ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВКЛАДА ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКОЙ ПОДСИСТЕМЫ В МОДУЛИ УПРУГОСТИ

Вклад ЯТ-подсистемы в модули упругости проявляется в виде пика в мнимой части и минимума в действительной части в области температур $T \approx T_1$. Температура T_1 определяется из условия $\omega\tau(T_1) = 1$. Изотермические модули, как это следует из табл. 1, обратно пропорциональны температуре. В связи с этим положение пика релаксационного поглощения, строго говоря, не совпадает с T_1 , но значение T_1 можно определить из максимума функции

$$f(T) = \text{Im}[c^{JT}(T)] T/c_0.$$

С учетом определения T_1 , выражение (11) можно представить в виде

$$\frac{c^{JT}}{c_0} = 2 \frac{\text{Re}[c^{JT}(T_1)]}{c_0} \frac{T_1}{T} \frac{1}{1 + (\omega\tau)^2} + 2i \frac{\text{Im}[c^{JT}(T_1)]}{c_0} \frac{T_1}{T} \frac{\omega\tau}{1 + (\omega\tau)^2}. \quad (30)$$

При этом из уравнения (11) следует, что

$$\text{Re}[c^{JT}(T_1)] = -\text{Im}[c^{JT}(T_1)]. \quad (31)$$

На рис. 2 и 3 видно, что аномалии релаксационной природы в примесном кристалле на частоте $\omega/2\pi \approx 56\text{--}59$ МГц наблюдаются при температуре $T \approx 24\text{--}25$ К. Можно ожидать, что потенциальные барьеры во флюорите $\text{CaF}_2 : \text{Cu}^{2+}$ будут ниже, чем в кристалле $\text{CaF}_2 : \text{Ni}^{2+}$, и необходимо применять второй из описанных методов выделения ЯТ-вклада в модули, аналогичный использованному для $\text{CaF}_2 : \text{Cr}^{2+}$. Он состоит из а) вычитания фонового модуля $\Delta c_{ij}^b(T)$ из измеренного в ходе эксперимента $\Delta c_{ij}(T)$ (при этом к мнимой части должна быть добавлена величина c_{ij}^{JT} , соответствующая низкотемпературному пределу, поскольку измеряются изменения модуля, а не сам модуль) и б) моделирования $c_{ij}^{JT}(T)$ с использованием выражения (30), в котором подгоночными параметрами являются следующие:

$$\text{Re}[c^{JT}(T_1)] T_1/c_0, \quad \text{Im}[c^{JT}(T_1)] T_1/c_0, \\ \tau_0, \quad V_0, \quad B_t, \quad B_t/\Theta^2.$$

Первые два подгоночных параметра задают масштаб изменений $c_{ij}^{JT}(T)$ (его действительной и мнимой частей) и должны удовлетворять соотношению (31), а остальные параметры определяют функциональную зависимость ЯТ-вклада в модули упругости от времени релаксации

$$\tau = (\tau_a^{-1} + \tau_t^{-1} + \tau_R^{-1})^{-1}.$$

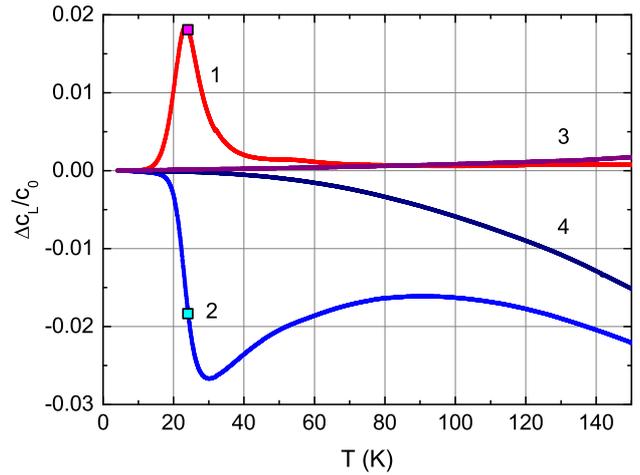


Рис. 2. (В цвете онлайн) Температурные зависимости мнимой (кривая 1) и действительной (кривая 2) составляющих модуля упругости $c_L = (c_{11} + c_{12} + 2c_{44})/2$, измеренные на частоте $\omega/2\pi = 55.8$ МГц в кристалле $\text{CaF}_2 : \text{Cu}^{2+}$. Кривые 3 и 4 — те же самые, но измеренные на частоте 55.5 МГц в номинально чистом кристалле CaF_2 . $\Delta c_L = c_L(T) - c_0$, $c_0 = c_L(T_0)$, $T_0 = 4.2$ К. Квадратные символы соответствуют условию $\omega\tau = 1$

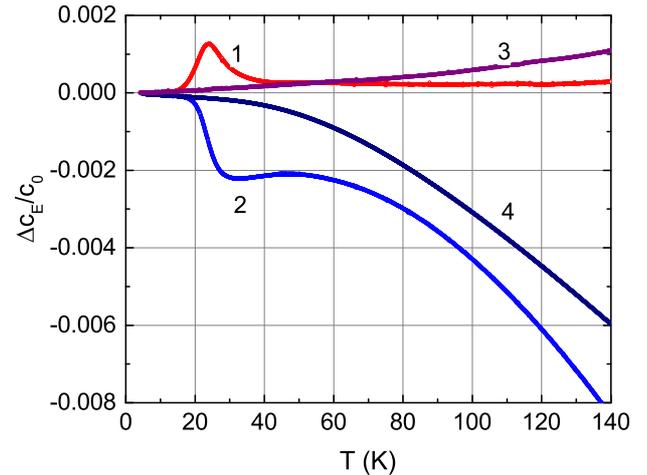


Рис. 3. (В цвете онлайн) Температурные зависимости мнимой (кривая 1) и действительной (кривая 2) составляющих модуля упругости $c_E = (c_{11} - c_{12})/2$, измеренные на частоте $\omega/2\pi = 59.6$ МГц в кристалле $\text{CaF}_2 : \text{Cu}^{2+}$. Кривые 3 и 4 — те же самые, но измеренные на частоте $\omega/2\pi = 57.1$ МГц в номинально чистом кристалле CaF_2 . $\Delta c_E = c_E(T) - c_0$, $c_0 = c_E(T_0)$, $T_0 = 4.2$ К

При этом слагаемое $\tau_a^{-1} = \tau_0^{-1} \exp(-V_0/T)$, описывающее активационный механизм, в основном определяет форму кривых в области наибольших изменений модуля; слагаемое $\tau_t^{-1} = B_t T$, связанное с туннельным механизмом, определяет форму

кривых в области низких температур; слагаемое $\tau_R^{-1} = (B_t/\Theta^2)T^3$, связанное с двухфононными переходами, — в промежуточной области. Результат обработки экспериментальных данных, приведенных на рис. 2, с помощью этой процедуры представлен на рис. 4.

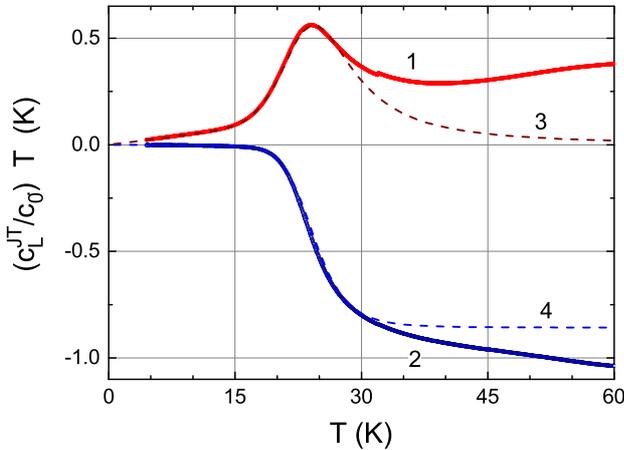


Рис. 4. (В цвете онлайн) Температурные зависимости мнимой (кривая 1) и действительной (кривая 2) частей величины $c_L^{JT} T / c_0 = [\Delta c_L(T) - \Delta c_L^b(T) + i \lim_{T \rightarrow 0} \{ \text{Im}[c_L^{JT}(T)] T / c_0 \}]$, где $\Delta c_L^b(T)$ — модуль, соответствующий номинально чистому кристаллу. Кривые 3 и 4 — модельные кривые, полученные при $\text{Re}[c_L^{JT}(T_1)] T_1 / c_0 = -0.429$ К, $\text{Im}[c_L^{JT}(T_1)] T_1 / c_0 = 0.562$ К, $\tau_a = 3 \cdot 10^{-12} \exp(170/T)$ с, $\tau_i = 6.5 \cdot 10^{-7} / T$ с, $\tau_R = 2 \cdot 10^{-3} / T^3$ с

Показанные на рис. 4 обе составляющие модуля (кривые 1 и 2) моделируются одной и той же температурной зависимостью времени релаксации. При этом видно, что модельные и экспериментальные кривые хорошо совпадают при температурах ниже 30 К, при более высоких температурах кривые расходятся. Причина этого заключается в следующем. Выражение для времени релаксации, записанное с учетом трех механизмов, соответствует низким температурам, когда ЯТ-комплексы находятся на нижних энергетических уровнях в минимумах АП. При повышении температуры начинают заселяться более высокоэнергетические уровни (которые не учтены в выражениях (16)–(28)), и таких простых выражений как для времени релаксации, так и для изотермических моделей уже не будет. Величины $\text{Re}[c_L^{JT}(T_1)] T_1 / c_0$ и $\text{Im}[c_L^{JT}(T_1)] T_1 / c_0$ несколько различаются по модулю, хотя должны быть равны. Это различие можно объяснить тем, что температурная зависимость фонового поглощения (соответствующая номинально чистому кри-

сталлу) мала, в особенности при низких температурах, а релаксационное поглощение существенно больше. Поэтому ошибка в определении фонового поглощения незначительно влияет на результат. Напротив, действительные части модулей, относящиеся к примесному и чистому кристаллам, имеют сопоставимые по величине температурные изменения, что, естественно, приводит к большей погрешности.

С помощью подгонки, результаты которой представлены на рис. 4, мы определяем все параметры, характеризующие время релаксации. Из них наиболее существенным является энергия активации V_0 , которая определяет потенциальный барьер между минимумами АП. Поэтому важно убедиться в достоверности проведенного моделирования, учитывая большое число подгоночных параметров. Определив низкотемпературное значение ЯТ-вклада в модули упругости, используя для этого лишь два параметра — $\text{Im}[c_L^{JT}(T_1)] T_1 / c_0$ и B (а точнее, — их произведение, т. е. фактически один), можно построить температурную зависимость времени релаксации и из нее определить значение V_0 .

Отметим, что температурную зависимость времени релаксации можно получить и из данных о скорости ультразвука $\text{Re}[c_L^{JT}(T)] T / c_0$ измеряя $\Delta v(T) / v_0$ в примесном и номинально чистом кристаллах. Они имеют сопоставимые температурные изменения, что влияет на точность определения $\text{Re}[c_L^{JT}(T)] T / c_0$, а значит, и $\tau(T)$.

Оптимальным вариантом является построение температурной зависимости времени релаксации как по данным о поглощении, так и по данным о дисперсии. Это совершенно независимые измерения, более того, обработка результатов проводится по разным формулам, что дает хороший инструмент для верификации полученных результатов.

6. ВРЕМЯ РЕЛАКСАЦИИ

В первых работах, публикующих данные о времени релаксации ЯТ-подсистемы, за температуру, соответствующую условию $\omega\tau = 1$, принималась температура T_m , при которой наблюдался пик поглощения $\Delta\alpha(T)$ [3, 11]. Учет температурной зависимости изотермического модуля привел нас к выводу, что более точным определением температуры, соответствующей условию $\omega\tau(T_1) = 1$, является температура T_1 максимума функции $\Delta\alpha(T)T$ (или $\text{Im}[\Delta c_{ij}(T)]T$). Оба эти подхода дают близкие результаты, если пик поглощения наблюдается выше 20 К. Это подтверждается данными, приведенными

на рис. 2 и 4, из которых видно, что максимумы на кривых 1 имеют место при одной и той же температуре. Однако если пик поглощения наблюдается при более низких температурах (как это, например, имело место в $\text{CaF}_2 : \text{Cr}^{2+}$ [16]), то становится заметным различие значений T_m и T_1 . Вывод выражений

$$\tau = \frac{1}{\omega} \frac{\text{Im}[c^{JT}(T_1)]T_1}{\text{Im}[c^{JT}(T)]T} \pm \frac{1}{\omega} \sqrt{\left[\frac{\text{Im}[c^{JT}(T_1)]T_1}{\text{Im}[c^{JT}(T)]T} \right]^2 - 1}, \quad (32)$$

$$\tau = \frac{1}{\omega} \sqrt{2 \frac{\text{Re}[c^{JT}(T_1)]T_1}{\text{Re}[c^{JT}(T)]T} - 1} \quad (33)$$

для температурных зависимостей времени релаксации $\tau(T)$ на основе экспериментальных данных о мнимой и действительной частях модуля упругости приведен в работе [16]. Зависимости $\tau(T)$ для кристалла $\text{CaF}_2 : \text{Cu}^{2+}$ показаны на рис. 5. Видно, что при температурах ниже 25 К обе зависимости практически совпадают. Различия возникают в области более высоких температур, и причины этих различий те же, что и в случае различия экспериментальных зависимостей компонент модулей упругости и модельных кривых, учитывающих лишь энергию основных состояний в минимумах АП и процессы перехода между ними.

Для того чтобы убедиться, что параметры, описывающие низкотемпературную релаксацию, выбраны правильно, на рис. 6 приведены модельная кривая $\text{Im}[c_L^{JT}(T)]_{mod}/c_0$, рассчитанная по формуле (30) с использованием значения для $\text{Im}[c_L^{JT}(T_1)]T_1/c_0$ и выражений для τ_a, τ_t, τ_R , приведенных в подписи к рис. 4 (кривая 1), кривая 2 — $\text{Im}[c_L^{JT}(T)]/c_0$, т.е. температурная зависимость ЯТ-вклада в мнимую составляющую модуля c_L , которая представляет собой экспериментальную зависимость $\text{Im}[\Delta c_L(T)]/c_0$, смещенную на величину $\text{Im}[c_L^{JT}(T_0)]_{mod}/c_0$, и штриховая кривая 3 — разность между этими зависимостями. Видно, что при температурах ниже 25 К разность между экспериментальной и модельной кривыми минимальна, что свидетельствует о справедливости утверждения о трех механизмах релаксации при низких температурах и правильности выбора параметров, характеризующих эти механизмы.

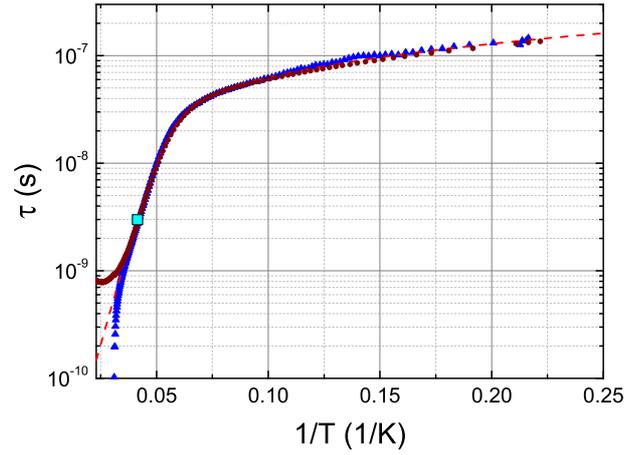


Рис. 5. (В цвете онлайн) Зависимости времени релаксации от обратной температуры, полученные на основе данных $\text{Re}[\Delta c_L(T)]/c_0$ (треугольники) и $\text{Im}[\Delta c_L(T)]/c_0$ (кружки) на частоте $\omega/2\pi = 55.8$ МГц в кристалле $\text{CaF}_2 : \text{Cu}^{2+}$. Штриховая кривая — результат моделирования времени релаксации с учетом трех механизмов, характеризуемых временами релаксации τ_a, τ_R и τ_t , значения которых приведены в подписи к рис. 4. Квадратный символ соответствует условию $\omega\tau = 1$

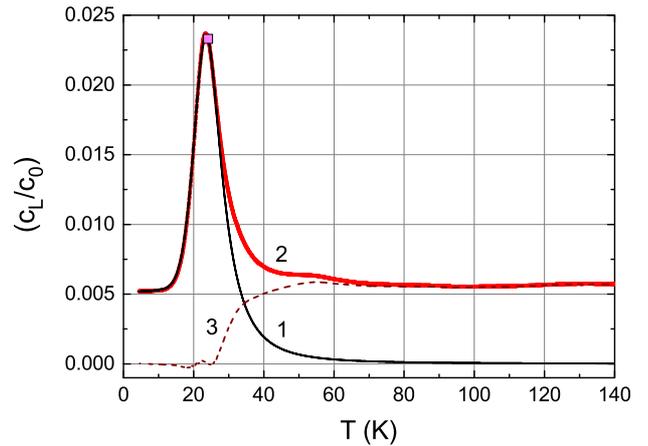


Рис. 6. (В цвете онлайн) Температурные зависимости ЯТ-вклада в мнимую составляющую модуля c_L : 1 — модельная кривая, рассчитанная по формуле (30) с использованием значений для $\text{Im}[c_L^{JT}(T_1)]T_1/c_0, \tau_a, \tau_t, \tau_R$, приведенных в подписи к рис. 4, $\omega/2\pi = 55.8$ МГц; 2 — экспериментальная кривая; 3 — разность между этими зависимостями (штриховой кривая). Квадратный символ соответствует условию $\omega\tau = 1$

7. ЛИНЕЙНЫЕ КОНСТАНТЫ ВИБРОННОЙ СВЯЗИ И ЭНЕРГИИ ЯН-ТЕЛЛЕРОВСКОЙ СТАБИЛИЗАЦИИ

Для вычисления линейных констант вибронной связи с использованием экспериментальных данных

Таблица 2. Первичные силовые константы, линейные константы вибронной связи и энергии ЯТ-стабилизации

K_E , дин/см	K_T , дин/см	$ F_E $, дин	$ F_T $, дин	E_E^{JT} , см ⁻¹	E_T^{JT} , см ⁻¹	E_{OR}^{JT} , см ⁻¹
$6.12 \cdot 10^4$	$3.64 \cdot 10^4$	$1.08 \cdot 10^{-4}$	$1.10 \cdot 10^{-4}$	479	$1.11 \cdot 10^3$	$1.30 \cdot 10^3$

следует воспользоваться уравнениями (11) и (30). Далее из записи в общем виде получить с учетом изотермических модулей, приведенных в табл. 1, выражения для конкретных тензорных компонент: c_E , c_{44} (или c_L). Полученные уравнения записать для температуры $T = T_1$ и решить их относительно линейных констант вибронной связи. В результате имеем

$$|F_E| = \sqrt{144 \frac{c_{E0} k_B T_1}{na_0^2} \frac{\text{Im}[c_E^{JT}(T_1)]}{c_{E0}}}, \quad (34)$$

$$|F_T| = \sqrt{\frac{9}{2} \frac{c_{T0} k_B T_1}{na_0^2} \frac{\text{Im}[c_T^{JT}(T_1)]}{c_{T0}}}, \quad (35)$$

$$|F_L| = \sqrt{\frac{9}{2} \frac{c_{L0} k_B T_1}{na_0^2} \frac{\text{Im}[c_L^{JT}(T_1)]}{c_{L0}}} - \frac{F_E^2}{96}, \quad (36)$$

где $c_{\beta 0} = c_{\beta}(T_0)$, $\beta = E, T, L$. Полученные значения констант $|F_E|$ и $|F_T|$ в кристалле $\text{CaF}_2 : \text{Cu}^{2+}$ приведены в табл. 2.

Энергии ЯТ-стабилизации, соответствующие тетрагональным и тригональным седловым точкам, определяются с помощью выражений (6) и (8). При этом предполагается, что первичные силовые константы могут быть заданы как

$$K_T = M\omega_\tau^2, \quad K_E = K_T c_E / c_{44}, \quad (37)$$

где $M = (m_{\text{Cu}} \cdot 8m_{\text{F}}) / (m_{\text{Cu}} + 8m_{\text{F}})$ — приведенная масса комплекса $\text{Cu}^{2+}\text{F}_8^-$, ω_τ — частота тригональной фононной моды, величина которой была установлена в оптическом эксперименте [27] ($\hbar\omega_\tau = 145 \text{ см}^{-1}$). В случае орторомбических глобальных минимумов АП энергия ЯТ-стабилизации определяется нулевыми колебаниями, энергией активации и наибольшей из энергий стабилизации, соответствующих седловым точкам (согласно данным табл. 2, это энергия E_T^{JT}):

$$E_{OR}^{JT} = \frac{1}{2} \hbar\omega_\tau + V_0 + E_T^{JT}. \quad (38)$$

8. КВАДРАТИЧНАЯ КОНСТАНТА ВИБРОННОЙ СВЯЗИ И КООРДИНАТЫ ЭКСТРЕМУМОВ АДИАБАТИЧЕСКОГО ПОТЕНЦИАЛА

Квадратичная константа вибронной связи W_{ET} и координаты орторомбических глобальных минимумов адиабатического потенциала могут быть рассчитаны с помощью следующего уравнения [28]:

$$\frac{E_{OR}^{JT}}{E_E^{JT}} = \frac{(A/B)^2 - (A/B)A + 1/4}{1 - A^2}, \quad (39)$$

где

$$A = \frac{W_{ET}}{\sqrt{K_E K_T}}, \quad (40)$$

$$B = \frac{W_{ET} F_E}{K_E F_T}. \quad (41)$$

Параметры $A/B = F_T \sqrt{K_E} / F_E \sqrt{K_T}$ и E_{OR}^{JT} / E_E^{JT} содержат величины, уже определенные нами и приведенные в табл. 2. В результате уравнение (39) представляет собой квадратное уравнение относительно A . В ультразвуковом эксперименте знак ли-

Таблица 3. Координаты глобальных минимумов адиабатического потенциала

	Q_ϑ	Q_ε	Q_ξ	Q_η	Q_ζ
Q_1^{OR}	$Q_{0\vartheta}^{OR}$	0	0	0	$Q_{0\zeta}^{OR}$
Q_2^{OR}	$Q_{0\vartheta}^{OR}$	0	0	0	$-Q_{0\zeta}^{OR}$
Q_3^{OR}	$-\frac{1}{2} Q_{0\vartheta}^{OR}$	$\frac{\sqrt{3}}{2} Q_{0\vartheta}^{OR}$	0	$Q_{0\zeta}^{OR}$	0
Q_4^{OR}	$-\frac{1}{2} Q_{0\vartheta}^{OR}$	$\frac{\sqrt{3}}{2} Q_{0\vartheta}^{OR}$	0	$-Q_{0\zeta}^{OR}$	0
Q_5^{OR}	$-\frac{1}{2} Q_{0\vartheta}^{OR}$	$-\frac{\sqrt{3}}{2} Q_{0\vartheta}^{OR}$	$Q_{0\zeta}^{OR}$	0	0
Q_6^{OR}	$-\frac{1}{2} Q_{0\vartheta}^{OR}$	$-\frac{\sqrt{3}}{2} Q_{0\vartheta}^{OR}$	$-Q_{0\zeta}^{OR}$	0	0

Таблица 4. Положение тетрагональных седловых точек адиабатического потенциала в координатах $(Q_\vartheta, Q_\varepsilon, Q_\xi, Q_\eta, Q_\zeta)$; $Q_0^E = F_E / K_E$

Q_1^E / Q_0^E	Q_2^E / Q_0^E	Q_3^E / Q_0^E
$(1, 0, 0, 0, 0)$	$(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0, 0, 0)$	$(-\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}, 0, 0, 0)$

Таблица 5. Положение тригональных седловых точек адиабатического потенциала в координатах $(Q_\vartheta, Q_\varepsilon, Q_\xi, Q_\eta, Q_\zeta)$; $Q_0^T = 2F_T/3K_T$

Q_1^T/Q_0^T	Q_2^T/Q_0^T	Q_3^T/Q_0^T	Q_4^T/Q_0^T
(0, 0, 1, 1, 1)	(0, 0, -1, 1, -1)	(0, 0, 1, -1, -1)	(0, 0, -1, -1, 1)

Таблица 6. Квадратичная константа вибронной связи W_{ET} и параметры, определяющие координаты экстремумов адиабатического потенциала, приведенные в табл. 3–5, для комплекса $\text{Cu}^{2+}\text{F}_8^-$ в матрице CaF_2

F_E, F_T	W_{ET} , дин/см	Q_0^E , Å	Q_0^T , Å	$Q_{0\vartheta}^{OR}$, Å	$Q_{0\zeta}^{OR}$, Å
$F_E > 0$	$-1.55 \cdot 10^4$	0.176	0.201	-0.184	0.380
$F_T > 0$	$3.85 \cdot 10^4$	—	—	0.300	0.618
$F_E < 0$	$-1.55 \cdot 10^4$	-0.176	-0.201	0.184	-0.380
$F_T < 0$	$3.85 \cdot 10^4$	—	—	-0.300	-0.618
$F_E > 0$	$-3.85 \cdot 10^4$	0.176	-0.201	0.300	-0.618
$F_T < 0$	$1.55 \cdot 10^4$	—	—	-0.184	-0.380
$F_E < 0$	$-3.85 \cdot 10^4$	-0.176	0.201	-0.300	0.618
$F_T > 0$	$1.55 \cdot 10^4$	—	—	0.184	0.380

нейных вибронных констант определить невозможно, поэтому число решений возрастает до восьми: четыре для положительного отношения A/B (или F_E/F_T) и четыре для отрицательного. Применимость квадратичного приближения уравнения (4) для $W(r, Q)$ ограничивает величину A неравенством $|A| < 1$ (т.е. $|W_{ET}| < \sqrt{K_E K_T}$).

Координаты глобальных минимумов АП представлены в табл. 3, при этом параметры, определяющие их, выражаются через A и B :

$$Q_{0\vartheta}^{OR} = -\frac{F_E(B - 2A^2)}{2K_E B(1 - A^2)}, \quad (42)$$

$$Q_{0\zeta}^{OR} = \frac{F_T(2 - B)}{2K_T(1 - A^2)}. \quad (43)$$

Координаты седловых точек приведены в табл. 4 и 5, а параметры, определяющие их, глобальные минимумы, а также значения W_{ET} , — в табл. 6. К сожалению, в формулы для вычисления перечисленных выше величин входит концентрация ЯТ-ионов, а методы определения концентрации интересующего нас химического элемента позволяют получить суммарную величину — концентрацию ионов во всех возможных зарядовых состояниях и всех возможных положениях в матрице кристалла (т.е. измеренные нами значения констант вибронной связи и энергий стабилизации являются оценками этих величин снизу).

Однако среди измеряемых величин имеются не зависящие от концентрации примесей. В первую очередь, к ним относится время релаксации, из которого находится энергия активации V_0 , представляющая собой разность между энергией ЯТ-стабилизации, соответствующей наиболее низкой седловой точке АП, и энергией нулевых колебаний в глобальном минимуме АП, отсчитанными от энергии ЯТ-стабилизации, соответствующей глобальному минимуму. Второй параметр, не зависящий от концентрации примеси, — это отношение линейных констант вибронной связи $|F_T/F_E|$. Эти константы зависят от концентрации, но одинаково, поэтому их отношение не зависит от n .

Величины V_0 и $|F_T/F_E|$ для разных кристаллов, исследованных в ультразвуковых экспериментах, приведены в табл. 7. Также там содержатся значения тригональных констант вибронной связи (но здесь надо иметь в виду сказанное выше об оценке этой величины снизу). Кристаллы перечислены в порядке возрастания V_0 . Видно, что линейные константы вибронной связи имеют порядок 10^{-4} дин, при этом $|F_T| \approx |F_E|$.

9. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе представлены результаты ультразвуковых исследований кристалла флюорита

Таблица 7. Энергии активации и линейные константы вибронной связи ЯТ-комплексов в кристаллах со структурой флюорита, исследованных ультразвуковыми методами

Кристалл	Основное состояние	$V_0, \text{см}^{-1}$	$ F_T/F_E $	$ F_T , \text{дин}$
$\text{CaF}_2 : \text{Cr}^{2+}$ [17]	${}^5T_{2g}(e_g^2t_{2g}^2)$	91.7	1.07	$8.8 \cdot 10^{-5}$
$\text{CaF}_2 : \text{Cu}^{2+}$	${}^2T_{2g}(e_g^4t_{2g}^5)$	118	1.02	$1.1 \cdot 10^{-4}$
$\text{SrF}_2 : \text{Cr}^{2+}$ [15]	${}^5T_{2g}(e_g^2t_{2g}^2)$	264	1.04	$5.5 \cdot 10^{-5}$
$\text{CaF}_2 : \text{Ni}^{2+}$ [18]	${}^3T_{1g}(e_g^4t_{2g}^4)$	394	1.07	$1.2 \cdot 10^{-4}$

$\text{CaF}_2 : \text{Cu}^{2+}$. На температурных зависимостях поглощения и скоростей продольной и поперечной ультразвуковых волн были обнаружены аномалии, типичные для релаксационных вкладов систем ЯТ-комплексов в модули упругости. При малых концентрациях ионов меди образуются ЯТ-центры с глобальными минимумами АП орторомбической симметрии, что согласуется с данными ЭПР [24]. ЯТ-комплекс $\text{Cu}^{2+}\text{F}_8^-$ описывается квадратичной $T \otimes (e + t_2)$ -задачей эффекта ЯТ. На основе экспериментальных данных были определены значения входящих в вибронный гамильтониан линейных (тетрагональной и тригональной), а также квадратичной констант вибронной связи, энергий ЯТ-стабилизации и координат этих экстремумов в пятимерном пространстве симметризованных координат.

Финансирование. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 22-22-00735).

ЛИТЕРАТУРА

1. *Optical Properties of 3d-Ions in Crystals: Spectroscopy and Crystal Field Analysis*, ed. by N. M. Avram and M. G. Brik, Springer, New York (2013).
2. H. A. Jahn and E. Teller, Proc. Roy. Soc. London A **161**, 220 (1937).
3. M. D. Sturge, in *Solid State Physics*, Vol. 20, Acad. Press, New York and London (1967), p. 91.
4. I. V. Bersuker, *The Jahn – Teller Effect*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (2006).
5. P. B. Oliete, V. M. Orera, and P. J. Alonso, Phys. Rev. B **53**, 3047 (1996).
6. М. М. Зарипов, В. Ф. Тарасов, В. А. Уланов, Г. С. Шакуров, М. И. Попов, ФТТ **37**, 806 (1995).
7. V. V. Gudkov and J. D. Gavenda, *Magnetoacoustic Phenomena in Solids*, Springer, New York (2000).
8. B. Luthi, *Physical Acoustics in the Solid State*, Springer, Berlin (2005).
9. В. В. Меньшенин, ЖЭТФ **160**, 95 (2021).
10. C. Zener, *Elasticity and Anelasticity of Metals*, Univ. of Chicago Press, Chicago (1948).
11. M. D. Sturge, J. T. Krause, E. M. Gyorgy, R. C. LeCraw, and F. R. Merritt, Phys. Rev. **155**, 218 (1967).
12. R. Pirc, B. Zeks, and P. Gosar, J. Phys. Chem. Solids **27**, 1219 (1966).
13. Н. С. Аверкиев, И. Б. Берсукер, В. В. Гудков, И. В. Жевстовских, М. Н. Сарычев, С. Жерлицын, С. Ясин, Ю. В. Коростелин, В. Т. Суриков, ЖЭТФ **156**, 87 (2019).
14. V. V. Gudkov, I. B. Bersuker, I. V. Zhevstovskikh, Yu. V. Korostelin, and A. I. Landman, J. Phys.: Condens. Matter **23**, 115401 (2011).
15. М. Н. Сарычев, W. A. L. Hosseny, A. S. Bondarevskaya, G. S. Shakurov, V. A. Ulanov, V. T. Surikov, I. V. Zhevstovskikh, N. S. Averkiev, and V. V. Gudkov, AIP Conf. Proc. **2313**, 030071 (2020).
16. М. Н. Сарычев, А. С. Бондаревская, И. В. Жевстовских, В. А. Уланов, Г. С. Шакуров, А. В. Егранов, В. Т. Суриков, Н. С. Аверкиев, В. В. Гудков, ЖЭТФ **159**, 892 (2021).
17. М. Н. Сарычев, W. A. L. Hosseny, I. V. Zhevstovskikh, V. A. Ulanov, G. S. Shakurov, A. V. Egranov, V. T. Surikov, N. S. Averkiev, and V. V. Gudkov, J. Phys.: Condens. Matter **34**, 225401 (2022).

18. M. N. Sarychev, W. A. L. Hosseney, A. S. Bondarevskaya, I. V. Zhevstovskikh, A. V. Egranov, O. S. Grunskiy, V. T. Surikov, N. S. Averkiev, and V. V. Gudkov, *J. Alloy. Comp.* **848**, 156167 (2020).
19. В. Л. Гинзбург, *Акуст. журнал* **1**, 31 (1955).
20. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика. Т. VII. Теория упругости*, Физматлит, Москва (2003).
21. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика. Т. V. Статистическая физика, Ч. I*. Физматлит, Москва (2002).
22. N. S. Averkiev, I. B. Bersuker, V. V. Gudkov, I. V. Zhevstovskikh, M. N. Sarychev, S. Zherlitsyn, S. Yasin, G. S. Shakurov, V. A. Ulanov, and V. T. Surikov, in *Fluorite: Structure, Chemistry and Applications*, Nova Sci. Publ., New York (2019), Ch. 2, p. 111.
23. М. Н. Сарычев, А. С. Бондаревская, И. В. Жевстовских, В. А. Уланов, Г. С. Шакуров, А. В. Егранов, В. Т. Суриков, Н. С. Аверкиев, В. В. Гудков, *Письма в ЖЭТФ* **113**, 52 (2021).
24. В. А. Уланов, М. М. Зарипов, Е. П. Жеглов, Р. М. Еремина, *ФТТ* **45**, 71 (2021).
25. S. K. Hoffmann and V. A. Ulanov, *J. Phys.: Condens. Matter* **12**, 1855 (2000).
26. P. García Fernández, J. A. Aramburu, M. T. Barriuso, and M. Moreno, *Phys. Rev. B* **69**, 174110 (2004).
27. W. Gehlhoff and W. Ulrici, *Phys. St. Sol. (b)* **102**, 11 (1980).
28. И. Б. Берсукер, В. З. Полингер, *ЖЭТФ* **66**, 2078 (1974).

МУЛЬТИФРАКТАЛЬНО-УСИЛЕННАЯ СВЕРХПРОВОДИМОСТЬ В ДВУМЕРНЫХ СИСТЕМАХ СО СПИН-ОРБИТАЛЬНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

Е. С. Андрияшина^{a,b}, И. С. Бурмистров^{b,c,}*

*^a Московский физико-технический институт,
141700, Москва, Россия*

*^b Институт теоретической физики им. Л. Д. Ландау,
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия*

*^c Международная лаборатория физики конденсированного состояния, НИУ ВШЭ,
101000, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 16.07.2022 г.,
после переработки 16.07.2022 г.
Принята к публикации 17.07.2022 г.

Известно, что комбинация локализации Андерсона и электрон-электронного взаимодействия приводит к усилению сверхпроводимости за счет мультифрактальности электронных волновых функций. В работе развита теория мультифрактально-усиленных сверхпроводящих состояний в двумерных системах при наличии спин-орбитального взаимодействия. При помощи нелинейной сигма-модели Финкельштейна выведены модифицированное уравнение Узалея и уравнение самосогласования для щели, которые учитывают перенормировки, вызванные беспорядком и квазичастичным взаимодействием. Мультифрактальные корреляции индуцируют энергетическую зависимость сверхпроводящей спектральной щели. Определены температура сверхпроводящего перехода и сверхпроводящая спектральная щель в случае изинговского и сильного спин-орбитального взаимодействий. В последнем случае энергетическая зависимость сверхпроводящей спектральной щели является выпуклой функцией энергии, тогда как в первом случае (как и при отсутствии спин-орбитального взаимодействия) — вогнутой. Мультифрактальность увеличивает не только температуру перехода, но и спектральную щель при нулевой температуре. Также изучены мезоскопические флуктуации локальной плотности состояний в сверхпроводящем состоянии. Как и в случае металла в нормальном состоянии, спин-орбитальное взаимодействие уменьшает амплитуду флуктуаций.

Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 95-летию Э. И. Раиша

DOI: 10.31857/S0044451022100091

EDN: ENPUZY

1. ВВЕДЕНИЕ

Сверхпроводимость и локализация Андерсона — два фундаментальных квантовых явления, которые до сих пор вызывают большой интерес. Первоначально считалось, что немагнитный беспорядок не влияет на s-волновой сверхпроводящий параметр порядка (это утверждение известно как “тео-

рема Андерсона” [1–3]). Позже парадигма сменилась в сторону того, чтобы рассматривать сверхпроводимость и беспорядок как антагонистов из-за локализации Андерсона [4]. Было предсказано, что сильная локализация подавляет сверхпроводимость [5–8]. Также, разрушение сверхпроводимости было предсказано и при слабом беспорядке за счет кулоновского взаимодействия [9–15]. Экспериментальное открытие перехода сверхпроводник–изолятор [16] подстегнуло интерес к изучению влияния беспорядка на сверхпроводящие корреляции в тонких пленках (см. обзоры [17–19]).

* E-mail: burmi@itp.ac.ru

В последнее время парадигма снова изменилась. В работах [20, 21] было показано, что локализация Андерсона может привести к повышению температуры сверхпроводящего перехода T_c для систем, близких к переходу Андерсона (например, в трех пространственных измерениях). Этот эффект появляется за счет мультифрактального поведения волновых функций — известного спутника локализации Андерсона — приводящего к усилению эффективного притяжения между электронами. Этот механизм работает при отсутствии дальнедействующего кулоновского отталкивания. Позднее мультифрактальное усиление T_c было предсказано для систем в режиме слабой локализации (или антилокализации), что актуально для слабонеупорядоченных сверхпроводящих пленок [22, 23]. Эти аналитические предсказания были дополнительно проверены численными расчетами неупорядоченной модели Хаббарда с притяжением на двумерной решетке [24–26]. Также в качестве демонстрации механизма мультифрактального усиления сверхпроводимости стоит упомянуть недавние экспериментальные работы [27, 28], в которых продемонстрировано увеличение T_c с ростом беспорядка в монослойных дихалькогенидах ниобия.

Одним из способов определения мультифрактально-усиленного сверхпроводящего состояния является изучение мезоскопических флуктуаций локальной плотности состояний [29, 30]. Потенциально это может быть очень многообещающим из-за (i) большого количества опубликованных данных о туннельной спектроскопии пространственных флуктуаций локальной плотности состояний в тонких сверхпроводящих пленках [31–36] и (ii) качественного согласия между теорией [37], развитой для температур $T > T_c$, и экспериментами по локальной плотности состояний в нормальной фазе неупорядоченных сверхпроводящих пленок.

Однако также существуют сверхпроводящие тонкие пленки и двумерные системы с нарушенной симметрией относительно вращения спина из-за наличия спин-орбитального взаимодействия. В их числе одиночные атомарные слои Pb на поверхностях Si [38], SrTiO₃ [39, 40], интерфейсы LaAlO₃/SrTiO₃ [41, 42] и чешуйки MoS₂ [43–45]. Кроме того, в монослоях дихалькогенида ниобия, в которых измерено мультифрактальное усиление сверхпроводимости [27, 28], предсказывается наличие спин-орбитального взаимодействия изинговского типа. Все вышеперечисленное требует развития теории мультифрактально-усиленной сверхпроводимости

в двумерных системах со спин-орбитальным взаимодействием.

В настоящей работе мы продолжаем теорию мультифрактального сверхпроводящего состояния, развитую в [29], на случай тонких пленок со спин-орбитальным взаимодействием. Как и в [29], мы сосредоточимся на случае слабого короткодействующего электрон-электронного взаимодействия¹). Мы рассматриваем беспорядок промежуточной силы (но все еще слабый), при котором анализ уравнений ренормализационной группы в нормальном состоянии предсказывает параметрически-усиленную T_c по сравнению с обычным результатом из теории Бардина–Купера–Шриффера (БКШ) [22]. Используя нелинейную сигма-модель Финкельштейна, мы выводим уравнение Узаделя и уравнение для спектральной щели. Оба уравнения модифицируются из-за наличия беспорядка и квазичастичных взаимодействий на масштабах, меньших сверхпроводящей длины когерентности. Эти уравнения решены для случаев изинговского и сильного спин-орбитального взаимодействий. В первом случае только одна триплетная диффузионная мода остается эффективной на больших масштабах длины, тогда как во втором случае все триплетные моды оказываются подавленными. В обоих случаях мы определяем температуру сверхпроводящего перехода и энергетическую зависимость спектральной щели при низких температурах $T \ll T_c$ и вблизи перехода $T_c - T \ll T_c$. Показано, что максимальная величина щели пропорциональна T_c , т. е. также усиливается из-за мультифрактальности. Кроме того, мы оцениваем мезоскопические флуктуации локальной плотности состояний. Эти флуктуации логарифмически расходятся с размером системы (если пренебречь эффектом дефазировки), несмотря на отсутствие вращательной симметрии в спиновом пространстве.

Статья построена следующим образом. В разд. 2 представлена общая схема описания сверхпроводящего состояния. Это описание применяется к случаю спин-орбитального взаимодействия изинговского типа в разделе 3. В разд. 4 мы рассматриваем случай сильной спин-орбитальной связи. Флуктуации локальной плотности состояний обсуждаются в разд. 5. Обсуждение результатов и выводы пред-

¹) Дальнедействующая составляющая (кулоновского) взаимодействия может быть подавлена в пленках с подложкой с высокой диэлектрической проницаемостью.

ставлены в разд. 6. Некоторые технические детали можно найти в Приложениях.

2. УРАВНЕНИЕ ДЛЯ СПЕКТРАЛЬНОЙ ЩЕЛИ

В грязных сверхпроводниках имеется существенное энергетическое окно между диффузионным масштабом $1/\tau$ (τ — среднее время свободного пробега) и энергетическим масштабом, связанным со сверхпроводимостью, в качестве которого естественно выбрать T_c . Поэтому для описания сверхпроводящих свойств, которые обычно соответствуют энергетической шкале T_c (соответствующая шкала длин — это сверхпроводящая длина когерентности, $\xi = \sqrt{D/T_c}$), необходимо учитывать эффекты, связанные с взаимодействием диффузионных мод в интервале энергий $T_c \lesssim \varepsilon \lesssim 1/\tau$. Как известно из исследований обычных грязных металлов, основным эффектом диффузионного режима является перенормировка физических параметров системы, т. е. проводимости, силы взаимодействия и т. д.

Такую перенормировку следует учитывать и в сверхпроводящем состоянии. Наиболее важным эффектом перенормировки является модификация уравнения Узаделя и уравнения самосогласования для спектральной щели. Следуя подходу, изложенному в [29], модифицированные уравнения могут быть получены с помощью нелинейной сигма-модели Финкельштейна (подробности см. в приложении А). Этот метод приводит к следующему модифицированному уравнению Узаделя для спектрального угла θ_ε :

$$\frac{D_\varepsilon}{2} \nabla^2 \theta_\varepsilon - |\varepsilon| \sin \theta_\varepsilon + \Delta_\varepsilon \cos \theta_\varepsilon = 0. \quad (1)$$

Здесь $\varepsilon = \pi T(2n + 1)$ — фермионная мадубаровская частота. Уравнение (1) отличается от стандартного уравнения Узаделя [46] зависящей от энергии спектральной щелью Δ_ε и зависящим от энергии коэффициентом диффузии D_ε [2].

В низшем порядке по беспорядку и взаимодействию спектральная щель удовлетворяет следующе-

му уравнению:

$$\Delta_\varepsilon = -2\pi T \sum_{\varepsilon'_n > 0} \sin \theta_{\varepsilon'} \left\{ \gamma_c - 2 \frac{(\gamma_s - \mathcal{N}\gamma_t)}{g} \times \int \frac{d^2 \mathbf{q}}{(2\pi)^2} \frac{D}{Dq^2 + E_\varepsilon + E_{\varepsilon'}} \right\}, \quad (2)$$

$$E_\varepsilon = |\varepsilon| \cos \theta_\varepsilon + \Delta \sin \theta_\varepsilon.$$

Здесь $\gamma_c < 0$, γ_s и γ_t — затравочные значения безразмерных амплитуд взаимодействия в куперовском канале, а также в синглетном и в триплетном каналах частица–дырка, соответственно. Мы предполагаем, что взаимодействие в канале частица–дырка слабое и короткодействующее. Поэтому рассмотрим случай $|\gamma_{c,s,t}| \ll 1$.

Сила беспорядка контролируется затравочной безразмерной (в единицах e^2/h) проводимостью $g = h/(e^2 R_\square)$, где R_\square — сопротивление пленки на квадрат в нормальном состоянии. Затравочный коэффициент диффузии D связан с проводимостью и плотностью состояний ν на энергии Ферми в нормальном состоянии через соотношение Эйнштейна $g = 2\nu D$. Параметр сверхпроводящего порядка Δ определяет затравочное значение сверхпроводящей щели.

Параметр \mathcal{N} в уравнении (2) показывает количество безмассовых триплетных диффузионных мод. Ниже мы сосредоточимся на случаях $\mathcal{N} = 0$ и $\mathcal{N} = 1$, тогда как случай $\mathcal{N} = 3$ рассматривался в [29].

Отметим, что аналогичная форма уравнения самосогласования для спектральной щели была получена в работах [47, 48] для случая только кулоновского взаимодействия ($\gamma_s = -1$) в пренебрежении обменным взаимодействием ($\gamma_t = 0$) с помощью диаграммной техники.

Уравнение (2) напоминает стандартное уравнение самосогласования из теории БКШ, если убрать часть, отвечающую логарифмически-перенормированному параметру притяжения γ_c . При этом перенормировка γ_c совпадает с аналогичной в нормальном металле с той разницей, что инфракрасная обрезка задается $\max\{\varepsilon, \varepsilon', \Delta\}$. Пертурбативный результат (2) для перенормировки γ_c может быть обобщен с помощью метода ренормализационной группы, см. [29].

Решая модифицированное уравнение Узаделя (1) в однородном случае с помощью $\sin \theta_\varepsilon = \Delta_\varepsilon / \sqrt{\varepsilon^2 + \Delta_\varepsilon^2}$, мы находим следующее уравнение самосогласования для Δ_ε :

$$\Delta_\varepsilon = -2\pi T \sum_{\varepsilon' > 0} \frac{\gamma_c (L_{E_\varepsilon + E_{\varepsilon'}}) \Delta_{\varepsilon'}}{\sqrt{\varepsilon'^2 + \Delta_{\varepsilon'}^2}}, \quad (3)$$

²⁾ В настоящей статье нас интересует пространственно-однородное на масштабах порядка ξ сверхпроводящее состояние. Поэтому здесь мы не будем обсуждать энергетическую зависимость коэффициента диффузии.

где $L_\varepsilon = \sqrt{D/\varepsilon}$ — диффузионная длина, связанная с энергией ε . Изменение γ_c с масштабом длины L определяется следующим уравнением ренормализационной группы (см. [29] для $\mathcal{N} = 3$):

$$\frac{d\gamma_c}{dy} = -\frac{t}{2}(\gamma_s - \mathcal{N}\gamma_t). \quad (4)$$

Здесь $y = \ln L/\ell$, где ℓ и L — длина свободного пробега и размер системы, соответственно. Безразмерное сопротивление обозначено через $t = 2/(\pi g)$. Затравочное значение t_0 предполагается малым, $t_0 \ll 1$.

Уравнение (4) не содержит стандартного члена $-\gamma_c^2$, ответственного за куперовскую неустойчивость в чистом случае. Этот вклад уже учтен в сверхпроводящем параметре порядка Δ (подробности см. в [29]).

Кажется заманчивым заменить в уравнении (3) Δ на Δ_ε в выражении для E_ε , так как это приведет уравнение в полностью самосогласованный вид относительно Δ_ε . Именно это и было сделано в статье [29] на основании соотношения между уравнением Узаделя, линейризованным по вариации θ_ε , и купероном на совпадающих энергиях. Однако дальнейший анализ показал, что куперон на несовпадающих мацубаровских энергиях имеет более сложную структуру после ренормировки³⁾. Как мы увидим ниже, точный вид разности $E_\varepsilon - |\varepsilon|$ не существенен для результатов, изложенных в этой статье.

Уравнение (4) необходимо дополнить уравнениями ренормализационной группы для $\gamma_{s,t}$ и t . Однако их точная форма зависит от числа триплетных мод \mathcal{N} . Ниже мы проанализируем уравнение (3) отдельно для случаев $\mathcal{N} = 0$ и 1. В дальнейшем будем всегда считать затравочные значения взаимодействия и беспорядка слабыми: $|\gamma_{s0}|, |\gamma_{t0}|, |\gamma_{c0}|, t_0 \ll 1$.

3. $\mathcal{N} = 1$: ИЗИНГОВСКОЕ СПИН-ОРБИТАЛЬНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

В данном разделе мы сосредоточимся на сверхпроводящих пленках с так называемым изинговским спин-орбитальным взаимодействием. Это взаимодействие заставляет спины электронов ориентироваться в направлении из плоскости двумерного движения. В этом случае скорости переворота спина для проекций в плоскости меньше, чем для проекции перпендикулярной плоскости,

$1/\tau_{so}^{x,y} \ll 1/\tau_{so}^z$. Поэтому одна триплетная диффузионная мода, соответствующая проекции полного спина $S_z = 0$, как и синглетная диффузионная мода, остается бесщелевой. Таким образом, для изинговского спин-орбитального взаимодействия реализуется случай $\mathcal{N} = 1$.

Для анализа уравнения (3) необходимо учесть зависимость γ_c от масштаба длины. В работе [23] полная система однопетлевых уравнений ренормгруппы для $\gamma_{s,t,c}$ и t была получена с помощью перенормировки нелинейной сигма-модели выше температуры сверхпроводящего перехода с помощью фонового поля. Применяя тот же метод к сверхпроводящему состоянию, находим

$$\frac{dt}{dy} = -\frac{t^2}{2}(\gamma_s + \gamma_t + 2\gamma_c), \quad (5a)$$

$$\frac{d}{dy} \begin{pmatrix} \gamma_s \\ \gamma_t \\ \gamma_c \end{pmatrix} = -\frac{t}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & -2 \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_s \\ \gamma_t \\ \gamma_c \end{pmatrix}. \quad (5b)$$

Отметим, что уравнение (5a) записано в предположении $|\gamma_{s,t,c}| \ll 1$. Так же, как и в нормальном металле [49], слабая локализация и слабая антилокализация компенсируют друг друга при наличии изинговского спин-орбитального взаимодействия. Из уравнения (5a) мы заключаем, что в главном порядке безразмерное сопротивление t остается почти постоянным. Поэтому в дальнейшем в этом разделе мы будем предполагать $t \simeq t_0$. Система (5b) указывает на то, что при ренормгрупповом потоке параметры взаимодействия приближаются к так называемой линии БКШ $-\gamma_s = \gamma_t = \gamma_c \equiv \gamma$ [22]. Чтобы описать поведение системы на масштабах длины $y \gtrsim t_0^{-1}$, мы проецируем уравнение (5b) на БКШ-линию и далее будем работать с эффективным параметром взаимодействия γ , удовлетворяющем соотношению

$$d\gamma/dy \simeq t_0\gamma, \quad \gamma_0 = (\gamma_{t0} - \gamma_{s0} + 2\gamma_{c0})/4 < 0. \quad (6)$$

Решая это уравнение, находим

$$\gamma(L) = \gamma_0(L/\ell)^{t_0}. \quad (7)$$

В дальнейшем мы считаем, что беспорядок доминирует над взаимодействием, т. е. $t_0 \gg |\gamma_0|$. Как известно [22], именно в этом режиме ожидается мультифрактальное повышение температуры сверхпроводящего перехода. Критическую температуру T_c можно оценить из соотношения $|\gamma(L_{T_c})| \sim t_0$ (см. приложение В). Такая оценка дает

$$T_c \sim (1/\tau)(|\gamma_0|/t_0)^{2/t_0}. \quad (8)$$

³⁾ Авторы благодарны П. Носову за это замечание.

Отметим, что температура перехода T_c соответствует $y_c \sim t_0^{-1} \ln(t_0/|\gamma_0|) \gg t_0^{-1}$, что оправдывает проекцию на БКШ-линию.

3.1. Критическая температура

Более точно температуру T_c перехода в сверхпроводящее состояние можно определить, решая линейризованное уравнение самосогласования (3). Отметим также, что после проецирования уравнения самосогласования (3) на БКШ линию γ_c в нем заменится на γ . Таким образом, мы получаем следующее линейризованное уравнение самосогласования:

$$\Delta_\varepsilon = -2\pi T \sum_{\varepsilon' > 0} \gamma(L_{\varepsilon+\varepsilon'}) \frac{\Delta_{\varepsilon'}}{\varepsilon'}. \quad (9)$$

Принимая во внимание реальную зависимость $\gamma(L)$ от L , см. (7), найдем

$$\Delta_n = \frac{|\gamma_0|}{(2\pi T\tau)^{t_0/2}} \sum_{n' \geq 0}^{n_{\max}} \frac{\Delta_{n'}}{(n+n'+1)^{t_0/2}(n'+1/2)}, \quad (10)$$

где $n_{\max} \simeq 1/(2\pi T\tau)$ — естественная обрезка для мацубаровских энергий, связанная с тем, что мы работаем в диффузионном режиме. Поиск T_c из уравнения (10) можно переформулировать как задачу о нахождении максимального собственного значения соответствующей матрицы. Температура сверхпроводящего перехода удовлетворяет $(2\pi T_c\tau)^{t_0/2} = |\gamma_0|\lambda_M$, где λ_M — максимальное собственное значение матрицы $M_{nn'} = (n+n'+1)^{-t_0/2}(n'+1/2)^{-1}$.

Численное решение уравнения (10) с помощью степенного метода (см. приложение С) дает $\lambda_M \simeq 1.4/t_0$. Значит,

$$T_c \simeq \frac{1}{2\pi\tau} (1.4|\gamma_0|/t_0)^{2/t_0}. \quad (11)$$

Правый собственный вектор r_n матрицы M , соответствующий λ_M , показан на рис. 1. (Левый собственный вектор матрицы M выражается через r_n как $l_n = r_n/(n+1/2)$.) Отметим, что спектральная щель существенно зависит от энергии, что отличается от модели БКШ, в которой щель постоянна.

Результат (11) можно также обосновать аналитически. Сначала в уравнении (10) заменим $(n+n'+1)^{t_0/2}$ на $\max\{(n+1/2)^{t_0/2}, (n'+1/2)^{t_0/2}\}$. Это оправдано малостью показателя $t_0 \ll 1$. Далее вводим переменную

$$u_\varepsilon = \frac{2}{t_0} |\gamma(L_\varepsilon)| = \frac{2|\gamma_0|}{t_0} (\varepsilon\tau)^{-t_0/2}. \quad (12)$$

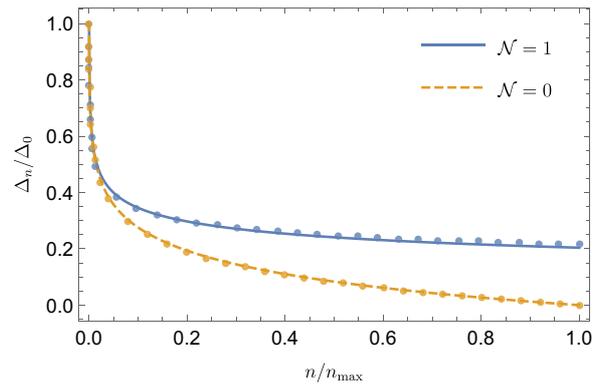


Рис. 1. Зависимость спектральной щели Δ_n от мацубаровских энергий $\varepsilon_n = 2\pi T(n+1/2)$ при T вблизи критической температуры T_c . Сплошная и штриховая линии показывают аналитические выражения (15) и (41), соответственно. Точками соответствующих цветов отмечены численные решения для ведущих собственных векторов из уравнений (10) и (36)

Затем, применяя пересуммирование методом Эйлера – Маклорена к правой части уравнения (9), получаем

$$\Delta_{u_n} \simeq u_n \int_{u_n}^{u_0} du \frac{\Delta_u}{u} + \int_{u_\infty}^{u_n} du \Delta_u + \frac{at_0}{2} u_n \Delta_{u_0}, \quad (13a)$$

$$u_\infty \equiv u_{1/\tau} \sim |\gamma_0|/t_0 \ll 1, \quad (13b)$$

$$a = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} 2^{2k-1} B_{2k}/k \approx 1.27. \quad (13c)$$

Здесь u_∞ соответствует n_{\max} , а величины B_{2k} обозначают четные числа Бернулли. При $T = T_c$ ищем решение уравнения (13a) в виде $\Delta_{u_n} = \Delta_{u_0} f(u_n)$ с условием $f(u_0) = 1$. Интегральное уравнение (13a) можно свести к следующей задаче Коши для неизвестной функции $f(u)$:

$$\begin{aligned} f''(u) &= -f(u)/u, \\ f'(u_0) &= at_0/2, \quad f'(u_\infty) = f(u_\infty)/u_\infty. \end{aligned} \quad (14)$$

Решая уравнение (14), получаем

$$f(u) = \frac{F_1(u)}{F_1(u_0)}, \quad F_1(u) \simeq \sqrt{u} J_1(2\sqrt{u}). \quad (15)$$

Здесь $J_1(x)$ — функция Бесселя первого рода. Отметим, что для краткости в приведенном выше выражении $F_1(u)$ записано в низшем порядке по малым параметрам $|\gamma_0| \ll t_0 \ll 1$. Хотя легко можно найти точное решение для $f(u)$, в дальнейшем оно нам не понадобится. Отметим также, что решение (15) удовлетворяет условию нормировки $f(u_0) = 1$ и граничному условию при $u = u_\infty$. Пока неизвестный

параметр u_0 определяет температуру сверхпроводящего перехода как

$$T_c = (2\pi\tau)^{-1}((2/u_0)|\gamma_0|/t_0)^{2/t_0}. \quad (16)$$

Его можно извлечь из граничного условия при $u = u_0$. Используя соотношение $(xJ_1(x))' = xJ_0(x)$ и пренебрегая $at_0/2$ в правой части граничного уравнения в точке $u = u_0$, находим $u_0 \simeq (j_{0,1})^2/4 \simeq 1.45$, где $j_{n,k}$ — k -й нуль функции Бесселя $J_n(x)$. Ответ (16) находится в количественном согласии с найденным численно результатом (11). Более того, как показано на рис. 1, отмечается замечательное согласие между функцией $f(u_n)$ и численно найденным собственным вектором, соответствующим максимальному собственному значению матрицы M .

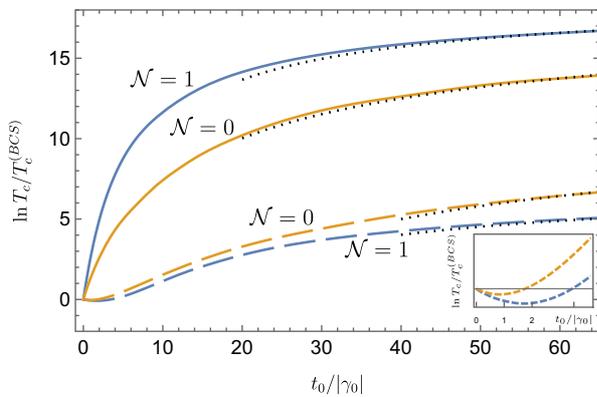


Рис. 2. Мультифрактальное увеличение температуры сверхпроводящего перехода T_c . Сплошными линиями показана зависимость $\ln T_c/T_c^{(BCS)}$ от величины отношения $t_0/|\gamma_0|$ при начальных параметрах взаимодействия $\gamma_{s0}, \gamma_{t0}, \gamma_{c0}$, лежащих на линии БКШ, т.е. когда $-\gamma_s = \gamma_t = \gamma_c = \gamma$ при $\mathcal{N} = 1$ и $-\gamma_s = \gamma_c = \gamma$ для $\mathcal{N} = 0$. Штриховые линии соответствующих цветов иллюстрируют поведение $\ln T_c/T_c^{(BCS)}$ при отклонении начальных параметров от БКШ-линии. Это может привести к снижению критической температуры T_c по сравнению с $T_c^{(BCS)}$ при малом отношении t_0 к $|\gamma_0|$ (см. вставку), но в итоге $\ln T_c/T_c^{(BCS)}$ становится положительным и продолжает расти с ростом беспорядка. Черные пунктирные линии соответствуют выражениям (16) и (42)

Уравнение (11) предсказывает увеличение T_c с увеличением беспорядка t_0 при фиксированном γ_0 . Однако уравнение (11) действительно только для $t_0 \gg |\gamma_0|$. Мы решаем уравнение самосогласования (10) для различных t_0 численно. Полученная зависимость T_c от t_0 представлена на рис. 2. Как видно, для начальных условий на БКШ-линии T_c растет с увеличением t_0 , достигая асимптотическое выражение (16) (черные пунктирные линии) при

$t_0 \gg |\gamma_0|$. При удалении первоначальной системы от линии БКШ T_c сначала подавляется с ростом t_0 , а затем начинает расти при $t_0 \gtrsim |\gamma_0|$.

Перейдем теперь к изучению поведения функции спектральной щели Δ_ε в зависимости от ε при различных температурных режимах: при T , близком к T_c , и при $T \ll T_c$.

3.2. Спектральная щель

3.2.1. Спектральная щель вблизи T_c

При $T = T_c$ амплитуда Δ_0 спектральной щели обращается в нуль. Чтобы найти зависимость Δ_ε от энергии при $T_c - T \ll T_c$, разложим модифицированное уравнение самосогласования до третьего порядка, получив

$$\Delta_\varepsilon = 2\pi T \sum_{\varepsilon' > 0} |\gamma(L_{\varepsilon+\varepsilon'})| \left(\frac{\Delta_{\varepsilon'}}{\varepsilon'} - \frac{\Delta_{\varepsilon'}^3}{2\varepsilon'^3} \right). \quad (17)$$

Отметим, что квадратичные по Δ_ε члены, появляющиеся из разложения $|\gamma(L_{E_\varepsilon+E_{\varepsilon'}})|$, подавлены за счет малого множителя $t_0 \ll 1$.

Будем искать решение в виде $\Delta_{\varepsilon_n} = \Delta_0(T)r_n$ с нормировкой $r_0 = 1$. Тогда уравнение (17) принимает вид

$$\lambda_M \left(\frac{T}{T_c} \right)^{t_0/2} r_n = \sum_{n'=0}^{n_{\max}} M_{nn'} \left[r_{n'} - \frac{\Delta_0^2(T)}{8\pi^2 T_c^2} r_{n'}^3 \right]. \quad (18)$$

Из условия $\Delta_0(T_c) = 0$ следует, что r_n — это компоненты правого собственного вектора матрицы $M_{nn'}$, соответствующего ее максимальному собственному значению λ_M . Далее, умножая слева обе части уравнения (18) на левый собственный вектор $l_n = r_n/(n+1/2)$ (соответствующий λ_M), находим

$$\Delta_0(T) = \left(b_N \frac{8\pi^2}{7\zeta(3)} T_c (T_c - T) \right)^{1/2}. \quad (19)$$

Здесь константа b_N при $\mathcal{N} = 1$ — это

$$b_1 = \frac{7\zeta(3)t_0}{2} \frac{\sum_{n=0}^{n_{\max}} r_n^2/(n+1/2)}{\sum_{n=0}^{n_{\max}} r_n^4/(n+1/2)^3}. \quad (20)$$

Мы выбрали нормировку b_1 таким образом, чтобы величина $b_1 - 1$ описывала отклонение от теории БКШ. Можно было бы ожидать ненулевого значения разности $b_1 - 1$ из-за сильной зависимости спектральной щели от энергии, но, как мы покажем ниже, в рамках нашего приближения это не так.

Прежде всего, заменив r_n^4 на $r_0^4 = 1$ в знаменателе уравнения (20), находим, что

$$\sum_{n=0}^{n_{\max}} \frac{r_n^4}{(n+1/2)^3} \simeq 7\zeta(3). \quad (21)$$

Далее, чтобы оценить числитель уравнения (20), мы заменяем r_n аналитическим выражением $r_n = f(u_n)$, см. уравнение (15). Получаем

$$\sum_{n=0}^{n_{\max}} \frac{r_n^2}{n+1/2} \simeq \frac{2}{t_0} \int_0^{u_0} \frac{du}{u} f^2(u) \simeq \frac{2}{t_0}. \quad (22)$$

Приняв во внимание все перечисленное выше, находим, что в пределе $t_0 \ll 1$ восстанавливается ответ из теории БКШ, т.е. $b_1 = 1$. Отметим также, что для нахождения поправок к значению $b_1 = 1$ из теории БКШ, необходимо знать точный вид зависимости $L_{E_\varepsilon+E_{\varepsilon'}}$ на энергиях Δ_ε и $\Delta_{\varepsilon'}$ в уравнении (3).

Можно оценить вклад других собственных мод в зависимость Δ_ε от ε . Записав $\Delta_\varepsilon = \Delta_0(T) \left(r_n + \sum_j s_j r_n^{(j)} \right)$, где $r_n^{(j)}$ — правые собственные векторы матрицы M с собственными значениями $\lambda_j < \lambda_M$, находим

$$s_j = - \frac{\lambda_j}{\lambda_M - \lambda_j} \frac{\Delta_0^2(T)}{8\pi^2 T_c^2} \frac{\sum_{n=0}^N l_n^{(j)} r_n^3 / (n+1/2)^2}{\sum_{n=0}^N l_n^{(j)} r_n^{(j)}}. \quad (23)$$

Здесь мы воспользовались условием ортогональности $\sum_n l_n^{(j)} r_n = 0$, где $l_n^{(j)}$ — левый собственный вектор матрицы $M_{nn'}$, соответствующий собственному значению λ_j . Мы видим, что применение других собственных мод при $T_c - T \ll T_c$ незначительно. Поэтому энергетическая зависимость Δ_ε от ε при $T_c - T \ll T_c$ практически такая же, как и на переходе.

3.2.2. Спектральная щель при $T \ll T_c$

Начнем с предела нулевой температуры. Чтобы изучить поведение щели при $T = 0$, в уравнении (3) заменим суммирование по мадубаровским частотам на интегрирование по энергии ε' . Отметим, что при этом существует два источника зависимости от ε' . Быстрая зависимость находится под корнем, а медленная (почти логарифмическая при $t_0 \ll 1$) зависимость зашита в γ . Зная поведение щели вблизи $T = T_c$, найденное в предыдущем разделе, мы ожидаем, что и при низких температурах Δ_ε будет убывающей функцией от ε . Введем характерную

энергию ε_0 , такую, что $\Delta_{\varepsilon_0} = \varepsilon_0$. Структура уравнения (3) указывает на то, что вплоть до энергий порядка $\varepsilon_0 = \Delta_{\varepsilon_0}$ щель лишь немного отклоняется от своего значения Δ_0 при $\varepsilon = 0$. Отсюда следует, что $\varepsilon_0 \sim \Delta_0$. Чтобы аккуратно найти связь между ε_0 и Δ_0 , а также зависимость Δ_ε при $\varepsilon < \Delta_0$, необходимо знать точное поведение инфракрасного масштаба длины $L_{E_\varepsilon+E_{\varepsilon'}}$ на энергиях Δ_ε и $\Delta_{\varepsilon'}$, см. уравнение (3). Однако при больших энергиях $\varepsilon \gg \Delta_\varepsilon$ такой трудности не возникает. Как мы покажем далее, в силу малости размерного сопротивления $t_0 \ll 1$, это условие выполняется при энергиях ε , не слишком близких к Δ_0 , т.е. при $\varepsilon \gtrsim \Delta_0$.

Когда $\varepsilon \gg \Delta_\varepsilon$, мы аппроксимируем уравнение самосогласования (3) следующим образом:

$$\Delta_\varepsilon \simeq |\gamma(L_\varepsilon)| \int_0^{\Delta_0} \frac{d\varepsilon' \Delta_0}{\sqrt{\varepsilon'^2 + \Delta_0^2}} + |\gamma(L_\varepsilon)| \int_{\Delta_0}^\varepsilon \frac{d\varepsilon' \Delta_{\varepsilon'}}{\sqrt{\varepsilon'^2 + \Delta_{\varepsilon'}^2}} + \int_{\varepsilon}^{1/\tau} \frac{d\varepsilon' \Delta_{\varepsilon'}}{\sqrt{\varepsilon'^2 + \Delta_{\varepsilon'}^2}} |\gamma(L_{\varepsilon'})|. \quad (24)$$

Если искать решение для Δ_ε в виде $\Delta_{u_\varepsilon} = \Delta_{u_0} f(u_\varepsilon)$, где u_ε определено в уравнении (12), то приведенное выше уравнение можно переписать в следующей дифференциальной форме

$$f''(u_\varepsilon) = - \frac{\varepsilon f(u_\varepsilon)/u_\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta_0^2} f^2(u_\varepsilon)}. \quad (25)$$

Так как мы работаем в режиме $\varepsilon \gg \Delta_\varepsilon$, то членом с Δ_0 под корнем в правой части уравнения (25) можно смело пренебречь. Тогда уравнение (25) сводится к уравнению (14) с теми же граничными условиями, за исключением того, что теперь $a = \operatorname{arcsinh}(1)$. Таким образом, решение можно сразу получить из формулы (15). Итак, мы находим следующее поведение спектральной щели в зависимости от энергии,

$$\Delta_\varepsilon \simeq \Delta_0 \begin{cases} 1, & \varepsilon \lesssim \Delta_0, \\ F_1(u_\varepsilon)/F_1(u_{\Delta_0}), & \varepsilon \gtrsim \Delta_0. \end{cases} \quad (26)$$

Теперь мы можем проверить предположение $\varepsilon \gg \Delta_\varepsilon$. Используя уравнение (26), находим, что

$$\frac{\varepsilon}{\Delta_\varepsilon} = \frac{u_{\Delta_0}^{2/t_0} F_1(u_{\Delta_0})}{u_\varepsilon^{2/t_0} F_1(u_\varepsilon)} \gg 1 \quad (27)$$

выполняется для всех ε , кроме энергий в непосредственной близости от $\varepsilon \sim \Delta_0$, т.е. в диапазоне $|\varepsilon - \Delta_0| \sim \Delta_0$.

Отметим идеальное совпадение обеих асимптотик (26) при $\varepsilon = \Delta_0$. Далее, используя граничное условие $f'(u_{\Delta_0}) = 0$, находим, что Δ_0 совпадает с T_c с точностью до численного множителя,

$$\Delta_0 \sim T_c. \quad (28)$$

Однако, как мы отмечали выше, наш подход неприменим в окрестности точки $\varepsilon = \Delta_0$. Поэтому мы не можем определить точную константу в отношении Δ_0/T_c . Подчеркнем однако, что зависимость функции спектральной щели при $\varepsilon \gg \Delta_0$ при $T = 0$ точно такая же, как и при T , близких к T_c .

Отметим, что щель параметрически усиливается на малых энергиях. Используя уравнение (26), находим, что при $\varepsilon \sim 1/\tau$ спектральная щель (совпадающая с параметром порядка Δ) пропорциональна $\Delta_0|\gamma_0|/t_0 \ll \Delta_0$. Типичное поведение Δ_ε показано на рис. 3.

При ненулевой температуре вид функции спектральной щели остается прежним, но происходит уменьшение величины Δ_0 при повышении температуры. Когда $T \ll \Delta_0$ зависимость Δ_0 от температуры можно оценить следующим образом. При $\varepsilon \gg \Delta_0$ щель Δ_ε удовлетворяет уравнению, аналогичному уравнению (24), в котором Δ_0 заменено на $\Delta_0(T)$ и

$$\begin{aligned} & \int_0^{\Delta_0} \frac{d\varepsilon' \Delta_0}{\sqrt{\varepsilon'^2 + \Delta_0^2}} \rightarrow \\ & \rightarrow 2\pi T \sum_{\varepsilon' > 0} \frac{\Delta_0(T)}{\sqrt{\varepsilon'^2 + \Delta_0^2(T)}} - \int_{\Delta_0(T)}^{1/\tau} \frac{d\varepsilon' \Delta_0(T)}{\sqrt{\varepsilon'^2 + \Delta_0^2(T)}} \simeq \\ & \simeq \int_0^{\Delta_0(T)} \frac{d\varepsilon' \Delta_0(T)}{\sqrt{\varepsilon'^2 + \Delta_0^2(T)}} - \sqrt{\frac{2\pi T}{\Delta_0}} e^{-\Delta_0/T}. \quad (29) \end{aligned}$$

Такая модификация уравнения (24) приводит к изменению константы a в граничных условиях (14): теперь $a = \operatorname{arcsinh}(1) - \sqrt{2\pi T/\Delta_0} \exp(-\Delta_0/T)$. Учитывая такой температурный сдвиг в константе a , находим

$$\Delta_0 - \Delta_0(T) \sim \sqrt{2\pi T \Delta_0} e^{-\Delta_0/T}, \quad T \ll \Delta_0. \quad (30)$$

Заметим, что поскольку этот результат получен из граничного условия при $\varepsilon = \Delta_0(T)$, численный множитель в уравнении (30) мы не можем определить однозначно.

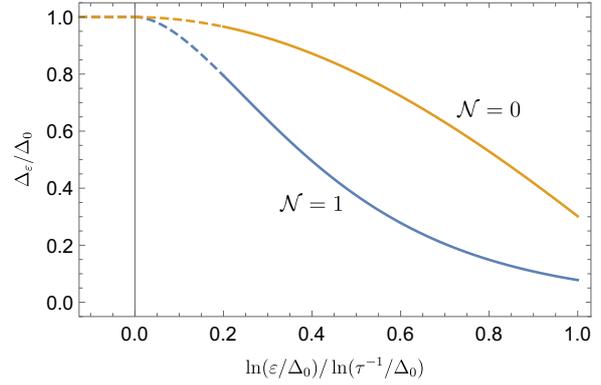


Рис. 3. Зависимость спектральной щели Δ_ε от энергии ε при низких температурах (см. текст). Безразмерная константа взаимодействия равна $|\gamma_0| = 0.005$, а безразмерное сопротивление $t_0 = 0.2$. Нижняя кривая иллюстрирует поведение Δ_ε для случая изинговского спин-орбитального взаимодействия ($\mathcal{N} = 1$), а верхняя — для случая сильного спин-орбитального взаимодействия ($\mathcal{N} = 0$)

4. $\mathcal{N} = 0$: СИЛЬНОЕ СПИН-ОРБИТАЛЬНОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

В этом разделе мы рассматриваем случай, когда все три скорости переворота спина, $1/\tau_{so}^{x,y,z}$, индуцированные спин-орбитальным взаимодействием, одного порядка. Тогда бесщелевыми остаются только диффузионные моды, соответствующие нулевому значению полного спина. Таким образом, количество безмассовых триплетных мод сводится к нулю, $\mathcal{N} = 0$.

При $\mathcal{N} = 0$ ренормгрупповой поток параметров взаимодействия $\gamma_{s,c}$ и безразмерного сопротивления t определяется следующими уравнениями [23]:

$$\frac{dt}{dy} = -t^2(1 + \gamma_s + 2\gamma_c)/2, \quad (31a)$$

$$\frac{d}{dy} \begin{pmatrix} \gamma_s \\ \gamma_c \end{pmatrix} = -\frac{t}{2} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_s \\ \gamma_c \end{pmatrix}. \quad (31b)$$

Отметим, что, в отличие от случая $\mathcal{N} = 1$, имеет место поправка, связанная со слабой антилокализацией (слагаемое с единицей в скобках в правой части уравнения (31a)), которая приводит к обращению t в нуль на больших размерах. В дальнейшем мы пренебрегаем членами, пропорциональными $\gamma_{s,c}$ (поправка Альтшулера–Аронова и поправка типа плотности состояний в куперовском канале) в уравнении (31a), по сравнению с эффектом слабой антилокализации. В соответствии с уравнением (31b) ренормгрупповой поток параметров взаимодействия

приближается к линии БКШ $-\gamma_s = \gamma_c \equiv \gamma$. Проецируя систему (31b) на БКШ-линию, находим

$$d\gamma/dy = t\gamma/2, \quad \gamma_0 = (2\gamma_{c0} - \gamma_{s0})/3 < 0. \quad (32)$$

Здесь γ_0 — затравочное значение эффективного коэффициента притяжения. Предположим, что $t_0 \gg |\gamma_0|$. Тогда решения уравнений (31a) и (32) будут иметь вид

$$t(L) = \frac{t_0}{1 + (t_0/2) \ln L/\ell}, \quad \gamma(L) = \gamma_0 \frac{t_0}{t(L)}. \quad (33)$$

То есть эффективное притяжение растет с увеличением масштаба длины. Критическая температура сверхпроводящего перехода может быть оценена из условия $|\gamma(L_{T_c})| \sim t(L_{T_c})$ (см. Приложение В). В результате имеем [22]

$$\ln 1/(T_c \tau) \sim \frac{1}{\sqrt{|\gamma_0| t_0}}. \quad (34)$$

Заметим, что при таком подходе численный множитель не может быть надежно определен.

4.1. Критическая температура

Чтобы определить температуру сверхпроводящего перехода, необходимо решить линеаризованное уравнение самосогласования (9). Для этого удобно ввести параметризацию критической температуры как

$$T_c = (2\pi\tau)^{-1} \exp(4/t_0 - 4/t_c), \quad (35)$$

где, исходя из оценки (34), мы ожидаем, что t_c будет порядка $\sqrt{|\gamma_0| t_0}$. При такой параметризации уравнение (9) принимает вид

$$\Delta_n = \frac{|\gamma_0| t_0}{4} \sum_{n'=0}^{n_{\max}} \frac{4/t_c - \ln(n + n' + 1)}{n' + 1/2} \Delta_{n'}. \quad (36)$$

Здесь $n_{\max} = 1/(2\pi T_c \tau) \simeq \exp(4/t_c)$. Как и прежде, об уравнении (36) можно думать как о задаче нахождения максимального собственного значения λ_M матрицы $M_{nn'}(\zeta) = (\zeta - \ln(n + n' + 1))/(n' + 1/2)$, где $\zeta = 4/t_c$. Численное решение дает $\lambda_M \approx 0.41(4/t_c)^2$ (см. Приложение С). Таким образом, мы находим

$$t_c \approx 1.3 \sqrt{|\gamma_0| t_0}. \quad (37)$$

Зависимость численно найденного собственного вектора, соответствующего максимальному собственному значению λ_M , представлена на рис. 1.

Как и в случае $\mathcal{N} = 1$, мы можем решить линеаризованное уравнение самосогласования (9) аналитически. Введем переменную

$$u_\varepsilon = \frac{4}{t(L_\varepsilon)} = \frac{4|\gamma(L_\varepsilon)|}{|\gamma_0| t_0} = \frac{4}{t_0} - \ln(\varepsilon\tau). \quad (38)$$

Заменив $\ln(n + n' + 1)$ на $\ln(\max\{n + 1/2, n' + 1/2\})$ и воспользовавшись формулой Эйлера – Маклорена, получим

$$\frac{4\Delta_{u_n}}{|\gamma_0| t_0} = u_n \int_{u_n}^{u_0} du \Delta_u + \int_{u_\infty}^{u_n} du u \Delta_u + a u_n \Delta_{u_0}. \quad (39)$$

Здесь a совпадает со значением, определенным в уравнении (13c). Затем, записывая $\Delta_{u_n} = \Delta_{u_0} f(u_n)$, где $f(u_0) = 1$, мы преобразуем приведенное выше уравнение к следующей дифференциальной задаче:

$$\begin{aligned} f''(u) &= -(|\gamma_0| t_0/4) f(u), \\ f(u_0) &= 1, \quad f'(u_\infty) = \frac{f(u_\infty)}{u_\infty}, \\ f'(u_0) &= \frac{|\gamma_0| t_0}{4}. \end{aligned} \quad (40)$$

Это уравнение элементарно решается:

$$f(u) = \frac{F_0(u)}{F_0(u_0)}, \quad F_0(u) \simeq \sin\left(u\sqrt{|\gamma_0| t_0/4}\right). \quad (41)$$

Снова отметим, что в приведенном выше уравнении решение $f(u)$ записано в низшем порядке по малым параметрам $|\gamma_0| \ll t_0 \ll 1$. Последний шаг — найти $u_0 = 4/t_c$ из соотношения $f'(u_0) = |\gamma_0| t_0/4$. После нехитрых вычислений получаем

$$u_0 \simeq \pi/\sqrt{|\gamma_0| t_0}, \quad \Leftrightarrow \quad t_c \simeq \frac{4}{\pi} \sqrt{|\gamma_0| t_0}. \quad (42)$$

Обратим внимание на замечательное согласие между численными и аналитическими результатами, уравнения (37) и (42): 1.3 и $4/\pi$, соответственно.

Численное решение уравнения (36) для T_c с произвольными значениями t_0 показано на рис. 2. Аналитическое выражение (42) (отмечено черной пунктирной линией) дает правильные асимптотические значения $\ln T_c/T_c^{(BCS)}$ в режиме больших значений отношения $t_0/|\gamma_0|$.

4.2. Спектральная щель

4.2.1. Спектральная щель при T_c

Чтобы найти Δ_ε при температурах близких к переходу, $T_c - T \ll T_c$, мы вновь воспользуемся уравнением (17). Для этого параметризуем температуру T с помощью переменной t_T , так что $T = (2\pi\tau)^{-1} \exp(4/t_0 - 4/t_T)$. Параметризовав Δ_ε как $\Delta_\varepsilon = \Delta_0(T) r_n$, запишем уравнение (17) в виде

$$\lambda_M r_n \simeq \sum_{n'=0}^{n_{\max}} M_{nn'}(4/t_T) \left[r_{n'} - \frac{\Delta_0^2(T) r_{n'}^3}{8\pi^2 T_c^2 (n' + 1/2)^2} \right]. \quad (43)$$

Здесь, напомним, λ_M обозначает максимальное собственное значение матрицы $M_{nn'}(4/t_c)$. Используя тождество $M_{nn'}(4/t_T) = M_{nn'}(4/t_c) + (4/t_T - 4/t_c)/(n' + 1/2)$ и приближение $4/t_T - 4/t_c \approx (T_c - T)/T_c$, перепишем уравнение (43) как

$$\lambda_M(4/t_c)r_n \simeq \sum_{n'=0}^{n_{\max}} M_{nn'}(4/t_c) \left[r_{n'} - \frac{\frac{\Delta_0^2(T)}{8\pi^2 T_c^2} r_{n'}^3}{(n' + 1/2)^2} \right] + \frac{T_c - T}{T_c} \sum_{n'=0}^{n_{\max}} \frac{r_{n'}}{n' + 1/2}. \quad (44)$$

При $T = T_c$ щель обращается в нуль. Отсюда следует, что r_n являются компонентами старшего собственного вектора матрицы $M_{nn'}(4/t_c)$. Умножая уравнение (44) на левый собственный вектор $M_{nn'}(4/t_c)$, $l_n = r_n/(n + 1/2)$, мы вновь приходим к выражению (19), где b_N для $N = 0$ равно

$$b_0 = \frac{7\zeta(3)}{\lambda_M} \frac{\left(\sum_{n=0}^{n_{\max}} r_n/(n + 1/2) \right)^2}{\sum_{n=0}^{n_{\max}} r_n^4/(n + 1/2)^3}. \quad (45)$$

Как и в случае $N = 1$, можно проверить, что в рамках нашего приближения восстанавливается результат $b_0 = 1$ из теории БКШ. Знаменатель в правой части уравнения (45) находится так же, как и в случае $N = 1$. В то же время в числителе мы используем $r_n = f(u_n)$, где $f(u)$ из уравнения (41). Используя $F_0(u) = \sin(u/\sqrt{\lambda_M})$ и $u_0 = \sqrt{\lambda_M}\pi/2$, получаем

$$\left(\sum_{n=0}^{n_{\max}} \frac{r_n}{n + 1/2} \right)^2 \simeq \left(\int_0^{u_0} du f(u) \right)^2 = \lambda_M. \quad (46)$$

Таким образом, объединяя результаты для числителя и знаменателя, мы восстанавливаем $b_0 = 1$.

4.2.2. Спектральная щель при $T \ll T_c$

Спектральную щель при $T = 0$ можно найти так же, как это было сделано в разд. 3.2.2 для $N = 1$. После несложных вычислений находим

$$\Delta_\varepsilon \simeq \Delta_0 \begin{cases} 1, & \varepsilon \lesssim \Delta_0, \\ F_0(u_\varepsilon)/F_0(u_{\Delta_0}), & \varepsilon \gtrsim \Delta_0. \end{cases} \quad (47)$$

Максимальная величина щели, Δ_0 , определяется выражением, подобным уравнению (35),

$$\Delta_0 = (2\pi\tau)^{-1} e^{4/t_0 - 4/t_{\Delta_0}}, \quad t_{\Delta_0} \sim \sqrt{|\gamma_0|t_0}. \quad (48)$$

К сожалению, в рамках нашего приближения мы не можем однозначно определить числовой множитель в отношении $t_{\Delta_0}/\sqrt{|\gamma_0|t_0}$, так как для этого требуется знание точной зависимости инфракрасной шкалы длин $L_{E_\varepsilon + E_{\varepsilon'}}$ от Δ_ε и $\Delta_{\varepsilon'}$, см.(3). Поскольку t_{Δ_0} стоит в показателе степени выражения для Δ_0 , мы не можем исключить возможность того, что Δ_0 параметрически отличается от T_c .

Отметим, что параметр сверхпроводящего порядка (совпадающий со спектральной щелью на энергиях $\varepsilon \sim 1/\tau$) пропорционален $\Delta_0\sqrt{|\gamma_0|t_0} \ll \Delta_0$. Типичная зависимость Δ_ε от ε показана на рис. 3.

Изменение Δ_ε с ростом температуры такое же, как и в случае $N = 1$. При $T \ll T_c$ амплитуда Δ_0 убывает в соответствии с уравнением (30).

5. ЛОКАЛЬНАЯ ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ

В данном разделе мы изучим локальную плотность состояний и ее мезоскопические флуктуации в сверхпроводящем состоянии. Для простоты считаем $T = 0$.

Усредненная по беспорядку плотность состояний может быть найдена из решения уравнения Узаделя

$$\langle \rho(E) \rangle = \nu \operatorname{Re} \cos \theta_{\varepsilon \rightarrow -iE+0} = \nu \operatorname{Re} \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta_\varepsilon^2}} \Big|_{\varepsilon \rightarrow -iE+0}. \quad (49)$$

Здесь подразумевается аналитическое продолжение от мацубаровской энергии к действительной, $i\varepsilon \rightarrow E + i0$.

Поведение плотности состояний при энергиях E , близких к Δ_0 , зависит от точной структуры Δ_ε при $\varepsilon \sim \Delta_0$. В рамках нашего подхода эта область энергии не доступна. Единственное, что можно утверждать наверняка, это существование спектральной щели порядка Δ_0 . Вдали от Δ_0 , т.е. в области $E \gtrsim \Delta_0$, используя малость $\Delta_\varepsilon/\varepsilon$, находим

$$\frac{\langle \rho(E) \rangle}{\nu} \simeq 1 + \operatorname{Re} \frac{\Delta_0^2(E)}{2E^2} \simeq 1 + \frac{\Delta_0^2}{2E^2} \frac{F_N^2(u_E)}{F_N^2(u_{\Delta_0})}. \quad (50)$$

Здесь $u_E = u_{\Delta_0}(E/\Delta_0)^{-t_0/2}$ и $u_{\Delta_0} = u_{\Delta_0} - \ln(E/\Delta_0)$ для $N = 1$ и 0, соответственно.

Теперь оценим мезоскопические флуктуации локальной плотности состояний. Это можно сделать, используя подход нелинейной сигма-модели, аналогичный тому, который используется в [29]. Ограничимся рассмотрением диапазона энергий

$$\Delta_0 \ll \frac{1}{\tau} e^{-2(2-N)/t_0} \ll E \lesssim \frac{1}{\tau}. \quad (51)$$

В этом интервале энергий можно пренебречь зависимостью Δ_ϵ от энергии и аппроксимировать ее неперенормированным значением Δ . Тогда для дисперсии локальной плотности состояний получаем следующий результат (см. Приложение D)

$$\frac{\langle [\delta\rho(E, \mathbf{r})]^2 \rangle}{\nu^2} = \frac{1 + \mathcal{N}}{g} \operatorname{Re} \int \frac{d^2\mathbf{q}}{(2\pi)^2} \left[\frac{2E^2 - \Delta^2}{E^2 - \Delta^2} \frac{1}{q^2} + \frac{\Delta^2}{E^2 - \Delta^2} \frac{D}{Dq^2 + 2i\sqrt{E^2 - \Delta^2}} \right]. \quad (52)$$

Отметим, что вклад в первой строке уравнения (52) соответствует корреляциям между двумя электронно-подобными возбуждениями. Они нечувствительны к наличию сверхпроводящей спектральной щели. Это объясняет, почему инфракрасная расходимость в диффузоне сохраняется внутри сверхпроводника. Вклад во второй строке уравнения (52) возникает из-за корреляций между электронно-подобными и дырочно-подобными возбуждениями, которые разделены удвоенной сверхпроводящей щелью.

Интегрируя по импульсу и раскладывая по $\Delta/E \ll 1$, находим

$$\frac{\langle [\delta\rho(E, \mathbf{r})]^2 \rangle}{\langle \rho(E) \rangle^2} = \frac{(1 + \mathcal{N})t_0}{2} \left(\ln \frac{L}{\ell} + \frac{\Delta^2}{2E^2} \ln \frac{L_E}{\ell} \right). \quad (53)$$

Подчеркнем логарифмическую расходимость дисперсии с размером системы L . Это свидетельствует о сильных мезоскопических флуктуациях локальной плотности состояний в неупорядоченных сверхпроводниках со спин-орбитальным взаимодействием, аналогичных случаю, когда спин-орбитальное взаимодействие отсутствует [29, 30].

До сих пор игнорируемая перенормировка диффузона приводит к замене L на $\min\{L, L_E^{(\phi)}\}$, где $L_E^{(\phi)}$ обозначает индуцированную длину дефазировки за счет электрон-электронных взаимодействий. К сожалению, в настоящее время не существует полной теории дефазировки в неупорядоченных сверхпроводниках. Однако, используя результаты работы [50], можно оценить длину дефазировки из-за электрон-электронного взаимодействия при $E \gg \Delta$ как $L_\Delta / (|\gamma_0| \sqrt{t_0}) \gg L_\Delta$. Заметим, что такая оценка применима при $T \ll T_c$. Вблизи сверхпроводящего перехода скорость дефазировки увеличивается из-за сверхпроводящих флуктуаций (подробнее см. [51]).

С помощью ренормализационной группы мы можем преобразовать пертурбативный и расходящийся в инфракрасном пределе ответ (53) в выраже-

ние для второго момента локальной плотности состояний:

$$\frac{\langle \rho^2(E, \mathbf{r}) \rangle}{\langle \rho(E) \rangle^2} = \begin{cases} (\min\{L, L_E^{(\phi)}\}/\ell)^{t_0}, & \mathcal{N} = 1, \\ 1 + (t_0/2) \ln(\min\{L, L_E^{(\phi)}\}/\ell), & \mathcal{N} = 0. \end{cases} \quad (54)$$

Можно также обобщить выражение (53) на случай парной корреляционной функции локальной плотности состояний при разных энергиях $E \gg \Delta$ и $E' = E + \omega \gg \Delta$ (см. Приложение D),

$$\frac{\langle \delta\rho(E, \mathbf{r}) \delta\rho(E', \mathbf{r}) \rangle}{\langle \rho(E) \rangle \langle \rho(E') \rangle} \simeq \frac{(1 + \mathcal{N})t_0}{2} \ln \frac{\min\{L, L_E^{(\phi)}, L_\omega\}}{\ell}. \quad (55)$$

Для автокорреляционной функции моментов можно использовать уравнение (54), в котором $\min\{L, L_E^{(\phi)}\}$ заменяется на $\min\{L, L_E^{(\phi)}, L_\omega\}$.

Отметим, что можно вычислить усредненные по беспорядку старшие моменты локальной плотности состояний. Аналогично случаю без спин-орбитального расщепления [29], моменты соответствуют лог-нормальной функции распределения для локальной плотности состояний.

6. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ И ВЫВОДЫ

В работе разработана теория мультифрактально усиленного сверхпроводящего состояния в тонких пленках со спин-орбитальным взаимодействием при наличии слабого короткодействующего электрон-электронного взаимодействия. Мы рассмотрели случай изинговского спин-орбитального взаимодействия ($\mathcal{N} = 1$), для которого перенормировка сопротивления в нормальном состоянии пренебрежимо мала, и случай сильного спин-орбитального взаимодействия ($\mathcal{N} = 0$), в котором перенормировка t определяется слабой антилокализацией. Вместе со случаем, когда спин-орбитальное взаимодействие отсутствует ($\mathcal{N} = 3$), который изучен в работе [29], построена теория для всех трех возможных вариантов поведения сопротивления в нормальном состоянии при увеличении размера системы: возрастающего, убывающего и постоянного.

Следуя подходу работы [29], мы рассмотрели флуктуации вокруг пространственно-однородной

среднеполевой седловой точки и получили модифицированное уравнение Узаделя и уравнение самосогласования, которые учитывают взаимное влияние беспорядка и взаимодействия при энергиях больше сверхпроводящей щели. Полученные уравнения позволяют точно определить температуру сверхпроводящего перехода. Мы показали, что T_c увеличивается (даже при $\mathcal{N} = 0$) по сравнению с результатом теории БКШ при отсутствии беспорядка. Решение модифицированного уравнения Узаделя и уравнения самосогласования дает T_c , которое параметрически совпадает с оценкой, полученной из анализа куперовской неустойчивости в уравнениях ренормализационной группы для нормальной фазы. Стоит сравнить эффект мультифрактального повышения критической температуры для разного числа триплетных мод. При отсутствии спин-орбитального взаимодействия, см. [29], сверхпроводящая фаза ожидается при температурах ниже $T_c^{\mathcal{N}=3} \sim \tau^{-1} \exp(-2/t_0)$, Напротив, мы предсказываем $T_c^{\mathcal{N}=1} \sim \tau^{-1} \exp(-(2/t_0) \ln(t_0/(1.4|\gamma_0|)))$ для $\mathcal{N} = 1$ и $T_c^{\mathcal{N}=0} \sim \tau^{-1} \exp(-3.1/\sqrt{|\gamma_0|t_0})$ для $\mathcal{N} = 0$, соответственно. Как видно, T_c возрастает с увеличением числа безмассовых триплетных диффузионных мод: $T_c^{\mathcal{N}=3} \gg T_c^{\mathcal{N}=1} \gg T_c^{\mathcal{N}=0}$.

Индукцированная беспорядком энергетическая зависимость эффективного притяжения переходит в энергетическую зависимость спектральной щели. Вид этой зависимости чувствителен к числу триплетных мод \mathcal{N} . В случае $\mathcal{N} = 1$ зависимость спектральной щели ведет себя как вогнутая функция энергии (то же верно и для $\mathcal{N} = 3$), см. рис. 3. Для $\mathcal{N} = 0$ Δ_ε становится выпуклой функцией ε . Беспорядок и взаимодействие приводит к параметрическому усилению спектральной щели при низких энергиях по сравнению с ее величиной при энергиях $\sim 1/\tau$.

Несмотря на такое сильное отличие от теории БКШ, в которой щель не зависит от энергии, основные соотношения для модели БКШ — поведение щели немного ниже T_c и при низких температурах $T \ll T_c$ — остаются прежними. Это указывает на возможность использования теории БКШ для описания температурной зависимости спектральной щели в слаборазупорядоченных пленках. При наличии спин-орбитального взаимодействия предсказаны сильные мезоскопические флуктуации локальной плотности состояний в сверхпроводящем состоянии. Эти флуктуации сохраняются вплоть до масштаба длины дефазировки. Наличие спин-орбитального взаимодействия уменьшает амплитуду дисперсии локальной плотности состояний в два раза (при

$\mathcal{N} = 1$) и в четыре раза (при $\mathcal{N} = 0$). Из-за разной энергетической зависимости щели для разных \mathcal{N} зависимость дисперсии от энергии чувствительна к числу безмассовых триплетных мод. Наиболее выраженная разница ожидается вблизи пика когерентности $E \sim \pm \Delta_0$. Однако эта область находится за пределами точности наших расчетов.

Поучительно сравнить флуктуации локальной плотности состояний с флуктуациями сверхпроводящего параметра порядка. Отметим, что хотя наш подход предполагает пространственно-постоянный параметр порядка, можно исследовать его мезоскопические флуктуации. В присутствии спин-орбитального взаимодействия находим

$$\frac{\langle(\delta\Delta)^2\rangle}{\Delta^2} \simeq \frac{(1+\mathcal{N})t_0}{2} \ln \frac{L_{\Delta_0}}{\ell}. \quad (56)$$

Подчеркнем сходство уравнений (55) и (56). Однако есть принципиальное отличие: мезоскопические флуктуации сверхпроводящего параметра порядка в инфракрасном пределе контролируются длиной когерентности L_{Δ_0} . Так как $L_E^{(\phi)} \gg L_{\Delta_0}$, мы ожидаем $\langle(\delta\rho)^2\rangle/\langle\rho\rangle^2 \gg \langle(\delta\Delta)^2\rangle/\Delta^2$. Для $\mathcal{N} = 1$ ($\mathcal{N} = 0$) мы можем оценить $\langle(\delta\Delta)^2\rangle/\Delta^2$ как $\sim \ln(t_0/|\gamma_0|)$ ($\sim \sqrt{t_0/|\gamma_0|}$), соответственно.

Представленные в статье результаты могут быть обобщены в нескольких направлениях. Наиболее интересным представляется изучение перенормировки диффузора, которое приведет к полностью самосогласованному уравнению для спектральной щели. Имея на руках такое уравнение, можно определить Δ_0 с точностью до числового множителя, чтобы сравнить его с выражением для T_c . Также такой расчет для диффузора позволяет определить длину дефазировки, которая служит отсечкой для мезоскопических флуктуаций локальной плотности состояний. Далее нашу теорию можно расширить, включив в нее кулоновское взаимодействие. Кроме того, было бы интересно выйти за рамки слабой связи для сверхпроводимости и изучить мультифрактальные эффекты в кроссовере БКШ–БЭК [52, 53]. Также наша работа может быть продолжена на рассмотрение систем с сингулярным динамическим взаимодействием между электронами при наличии беспорядка, см. [54–59]. Достигнуто это может быть с помощью подходов, описанных в работах [60, 61].

Наконец, отметим, что наша теория игнорирует фазовые флуктуации параметра порядка. Последние, как известно, ответственны за переход Березинского–Костерлица–Таулесса в сверхпроводящих пленках. Такие флуктуации могут быть учтены аналогично тому, как это сделано в работах [62, 63].

Однако для слабонеупорядоченных сверхпроводящих пленок эффекты, связанные с фазовыми флуктуациями, должны быть слабыми [62, 64].

Благодарности. Авторы выражают благодарность С. Brun, Т. Cren, F. Evers, И. Горному, М. Lizee, А. Мирлину, П. Носову, S. Raghu и М. Stosiek за сотрудничество в смежных проектах и полезные обсуждения.

Финансирование. Работа частично поддержана РФФИ (грант № 20-52-12013) и Программой фундаментальных исследований НИУ ВШЭ.

ПРИЛОЖЕНИЕ А

В данном приложении приводятся детали формализма нелинейной сигма-модели Финкельштейна.

Действие для электронной жидкости в неупорядоченном металле со спин-орбитальным взаимодействием определяется выражением

$$S = S_\sigma + S_{\text{int}}^{(\rho)} + S_{\text{int}}^{(\sigma)} + S_{\text{int}}^{(c)} + S_{\text{so}}, \quad (\text{A.1})$$

где первый член происходит от невзаимодействующих фермионов. Следующие три члена соответствуют электрон-электронным взаимодействиям в синглетном канале частица-дырка, $S_{\text{int}}^{(\rho)}$, в триплетном канале частица-дырка, $S_{\text{int}}^{(\sigma)}$, и в канале частица-частица $S_{\text{int}}^{(c)}$. Последнее слагаемое появляется из-за спин-орбитального взаимодействия. Вышеупомянутые вклады имеют вид (см. [67–69])

$$S_\sigma = -\frac{g}{32} \int_r \text{Tr}(\nabla Q)^2 + 2Z_\omega \int_r \text{Tr} \hat{\varepsilon} Q, \quad (\text{A.2a})$$

$$S_{\text{int}}^{(\rho)} = -\frac{\pi T}{4} \Gamma_s \sum_{r=0,3} \sum_{\alpha,n} \int_r \text{Tr} I_n^\alpha t_{r0} Q \text{Tr} I_{-n}^\alpha t_{r0} Q, \quad (\text{A.2b})$$

$$S_{\text{int}}^{(\sigma)} = -\frac{\pi T}{4} \Gamma_t \sum_{r=0,3} \sum_{\substack{\alpha,n \\ j=1,2,3}} \int_r \text{Tr} I_n^\alpha t_{rj} Q \text{Tr} I_{-n}^\alpha t_{rj} Q, \quad (\text{A.2c})$$

$$S_{\text{int}}^{(c)} = -\frac{\pi T}{4} \Gamma_c \sum_{r=1,2} \sum_{\alpha,n} \int_r \text{Tr} t_{r0} L_n^\alpha Q \text{Tr} t_{r0} L_n^\alpha Q, \quad (\text{A.2d})$$

$$S_{\text{so}} = \frac{\pi\nu}{2} \sum_{j=1,2,3} \frac{1}{\tau_{\text{so}}^{(j)}} \int_r \text{Tr}(t_{0j} Q)^2. \quad (\text{A.2e})$$

В приведенных выше выражениях g — полная друдовская проводимость (в единицах e^2/h , включая спин). Параметр Z_ω описывает изменение

скейлинга энергии [67]. Затравочное значение Z_ω равно $\pi\nu/4$. Амплитуды взаимодействия в синглетном, триплетном и частично-дырочном каналах обозначены как Γ_s , Γ_t и Γ_c , соответственно. Удобно ввести безразмерные параметры взаимодействия $\gamma_{s,t,c} \equiv \Gamma_{s,t,c}/Z_\omega$. $1/\tau_{\text{so}}^{(j)}$ обозначают скорости спин-орбитального рассеяния.

Матричное поле $Q(\mathbf{r})$ и след Tr действуют в рещичном (α, β) , в мацубаровском (n, m) , в спиновом $(j = 0, 1, 2, 3)$ пространствах и в пространстве частица-дырка $(r = 0, 1, 2, 3)$. Поле $Q(\mathbf{r})$ удовлетворяет нелинейному соотношению, а также соотношению симметрии зарядового сопряжения

$$Q^2 = 1, \quad \text{Tr} Q = 0, \quad Q = Q^\dagger = -CQ^T C, \quad (\text{A.3})$$

где $C = it_{12}$, а матрицы t_{rj} определяются выражениями

$$t_{rj} = \tau_r \otimes s_j, \quad r, j = 0, 1, 2, 3. \quad (\text{A.4})$$

В приведенном выше выражении индексы r и j отвечают пространству частица-дырка и спиновому пространству, соответственно. τ_r и s_j — стандартные матрицы Паули,

$$\begin{aligned} \tau_0/s_0 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, & \tau_1/s_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \\ \tau_2/s_2 &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, & \tau_3/s_3 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

Принимая во внимание ограничения (A.3), используем следующую параметризацию для матричного поля $Q(\mathbf{r})$

$$Q = U^{-1} \Lambda U, \quad U^\dagger = U^{-1}, \quad CU^T = U^{-1}C, \\ \Lambda_{nm}^{\alpha\beta} = \text{sgn} \varepsilon_n \delta_{\varepsilon_n, \varepsilon_m} \delta^{\alpha\beta} t_{00} \quad (\text{A.6})$$

Постоянные матрицы в действии (A.1) задаются следующими выражениями ($\omega_k = 2\pi T k$):

$$\begin{aligned} \hat{\varepsilon}_{nm}^{\alpha\beta} &= \varepsilon_n \delta_{\varepsilon_n, \varepsilon_m} \delta^{\alpha\beta} t_{00}, \\ (I_k^\gamma)_{nm}^{\alpha\beta} &= \delta_{\varepsilon_n - \varepsilon_m, \omega_k} \delta^{\alpha\beta} \delta^{\alpha\gamma} t_{00}, \\ (L_k^\gamma)_{nm}^{\alpha\beta} &= \delta_{\varepsilon_n + \varepsilon_m, \omega_k} \delta^{\alpha\beta} \delta^{\alpha\gamma} t_{00}. \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

Следуя работе [29], используем описанную выше технику для описания физики низких энергий в сверхпроводящем состоянии с нарушенной симметрией. Для этого необходимо выделить статический член с $n = 0$ в канале частица-частица, см. уравнение (A.2d), и ввести два расцепляющих

поля $\Delta_r^\alpha(\mathbf{r})$ с $r = 1, 2$. После преобразования Хаббарда – Стратоновича находим

$$S_{\text{int}}^{(c)} = \sum_{r=1,2} \int_{\mathbf{r}} \left[\frac{4Z_\omega}{\pi T \gamma_c} [\Delta_r^\alpha(\mathbf{r})]^2 + 2Z_\omega \Delta_r^\alpha(\mathbf{r}) \text{Tr} t_{r0} L_0^\alpha Q - \frac{\pi T}{4} \Gamma_c \sum_{n \neq 0} (\text{Tr} t_{r0} L_n^\alpha Q)^2 \right]. \quad (\text{A.8})$$

Вариация полного действия по $Q(\mathbf{r})$ и $\Delta_r^\alpha(\mathbf{r})$ приводит к уравнению Узаделя и уравнениям самосогласования для $\Delta_r^\alpha(\mathbf{r})$, $r = 1, 2$. В свою очередь, эти уравнения генерируют множество пространственно-неоднородных решений. Чтобы учесть их, мы учитываем, что $1/g \ll 1$, и используем метод ренормализационной группы, при котором пространственно-неоднородные решения $Q(\mathbf{r})$ рассматриваются как флуктуации вокруг некоторого пространственно-независимого решения \underline{Q} .

Сначала выделим пространственно-независимые и пространственно-зависимые компоненты полей $\Delta_r^\alpha(\mathbf{r})$, $r = 1, 2$:

$$\Delta_r^\alpha(\mathbf{r}) = \underline{\Delta}_r^\alpha + \delta \Delta_r^\alpha(\mathbf{r}), \quad \int_{\mathbf{r}} \delta \Delta_r^\alpha(\mathbf{r}) = 0. \quad (\text{A.9})$$

Отметим, что флуктуации параметра порядка теперь содержатся в $\delta \Delta_r^\alpha(\mathbf{r})$. С другой стороны, можно выполнить формально точное интегрирование по полям $\delta \Delta_r^\alpha(\mathbf{r})$. Оно полностью переносит информацию о флуктуациях параметра порядка на поле $Q(\mathbf{r})$. Таким образом, получаем

$$S_{\text{int}}^{(c)} = 2Z_\omega V \sum_{\alpha} \sum_{r=1,2} \left\{ \underline{\Delta}_r^\alpha \text{Tr} t_{r0} L_0^\alpha \bar{Q} + \frac{2}{\pi T \gamma_c} [\underline{\Delta}_r^\alpha]^2 \right\} + \hat{S}_{\text{int}}^{(c)}, \quad (\text{A.10})$$

где V — объем сверхпроводника,

$$\bar{Q} = \frac{1}{V} \int_{\mathbf{r}} Q(\mathbf{r}), \quad (\text{A.11})$$

и

$$\hat{S}_{\text{int}}^{(c)} = -\frac{\pi T}{4} \Gamma_c \sum_{\alpha, n} \sum_{r=1,2} \int_{\mathbf{r}} (\text{Tr} t_{r0} L_n^\alpha Q_n)^2. \quad (\text{A.12})$$

Здесь $Q_n = Q - \bar{Q} \delta_{n,0}$.

Описанная выше процедура приводит к новому седловому уравнению для $Q(\mathbf{r})$ и новым уравнениям самосогласования для $\underline{\Delta}_r^\alpha$:

$$D \nabla(Q \nabla Q) - [\hat{\varepsilon} + \hat{\Delta}, Q] + \frac{\pi T}{4} \sum_{\alpha, n} \left[\sum_{r=1,2} \gamma_c [t_{r0} L_n^\alpha, Q] \times \right. \\ \left. \times \text{Tr} t_{r0} L_n^\alpha Q_n + \sum_{r=0,3} \sum_{j=0}^3 \gamma_j [I_{-n}^\alpha t_{rj}, Q] \text{Tr} I_n^\alpha t_{rj} Q \right] = 0, \\ \underline{\Delta}_r^\alpha = \frac{\pi T}{4} |\gamma_c| \text{Tr} t_{r0} L_0^\alpha \bar{Q}, \quad r = 1, 2. \quad (\text{A.13})$$

Теперь можно исследовать решения этих уравнений. В приближении среднего поля мы игнорируем флуктуации и ищем пространственно-однородное решение. Это решение можно удобно параметризовать с помощью так называемого спектрального угла θ_{ε_n} , который является функцией мацубаровских энергий ε_n . С точки зрения спектрального угла решение седлового уравнения имеет вид

$$\underline{Q} = R^{-1} \Lambda R, \\ R_{nm}^{\alpha\beta} = \left[\delta_{\varepsilon_n, \varepsilon_m} \cos \frac{\theta_{\varepsilon_n}}{2}, \right. \\ \left. - t_\phi \delta_{\varepsilon_n, -\varepsilon_m} \text{sgn} \varepsilon_m \sin \frac{\theta_{\varepsilon_n}}{2} \right] \delta^{\alpha\beta}, \quad (\text{A.14}) \\ t_\phi = \cos \phi t_{10} + \sin \phi t_{20}, \\ \underline{\Delta}_1^\alpha = \Delta \cos \phi, \quad \underline{\Delta}_2^\alpha = \Delta \sin \phi.$$

Подставляя выражения для \underline{Q} и $\underline{\Delta}_r^\alpha$ из (A.14) в уравнение Узаделя и уравнения самосогласования, находим

$$\frac{D}{2} \nabla^2 \theta_{\varepsilon_n} - |\varepsilon_n| \sin \theta_{\varepsilon_n} + \Delta \cos \theta_{\varepsilon_n} = 0, \quad (\text{A.15a})$$

$$\Delta = \pi T |\gamma_c| \sum_{\varepsilon_n} \sin \theta_{\varepsilon_n}. \quad (\text{A.15b})$$

Пространственно-однородное решение уравнения (A.15a) приводит (A.15b) к обычному уравнению самосогласования из теории БКШ. При этом T_c становится нечувствительной к беспорядку в соответствии с «теоремой Андерсона».

Однако нас интересует более сложная картина, при которой учитываются флуктуации $Q(\mathbf{r})$ вокруг седлового решения \underline{Q} . Она соответствует взаимодействию диффузионных мод. Мы используем корневую параметризацию, чтобы получить пертурбативное разложение поля $Q(\mathbf{r})$ вокруг перевального решения

$$Q = R^{-1} \left(W + \Lambda \sqrt{1 - W^2} \right) R, \\ W = \begin{pmatrix} 0 & w \\ \bar{w} & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{A.16})$$

Здесь поле W удовлетворяет ограничениям зарядового сопряжения:

$$\bar{w} = -Cw^T C, \quad w = -Cw^* C. \quad (\text{A.17})$$

Прежде чем перейти к флуктуациям, нам также необходимо знать пропагаторы для диффузионных мод. Ограничимся низшим порядком по остаточному электрон-электронному взаимодействию, что соответствует малым значениям затравочных параметров взаимодействия $|\gamma_{s0,t0,c0}| \ll 1$. В этом приближении находим

$$\begin{aligned} & \left\langle [w_{rj}(\mathbf{p})]_{n_1 n_2}^{\alpha_1 \beta_1} [\bar{w}_{rj}(-\mathbf{p})]_{n_4 n_3}^{\beta_2 \alpha_2} \right\rangle = \\ & = \frac{2}{g} \delta^{\alpha_1 \alpha_2} \delta^{\beta_1 \beta_2} \delta_{\varepsilon_{n_1}, \varepsilon_{n_3}} \times \\ & \times \delta_{\varepsilon_{n_2}, \varepsilon_{n_4}} \mathcal{D}_p(i\varepsilon_{n_1}, i\varepsilon_{n_2}), \\ & \mathcal{D}_p(i\varepsilon_{n_1}, i\varepsilon_{n_2}) = \frac{1}{p^2 + E_{\varepsilon_{n_1}}/D + E_{\varepsilon_{n_2}}/D}, \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

где $E_{\varepsilon_n} = |\varepsilon_n| \cos \theta_{\varepsilon_n} + \Delta \sin \theta_{\varepsilon_n}$. Здесь важно помнить, что результат (A.18) игнорирует спин-орбитальный член в действии, S_{so} . Он приводит к появлению дополнительного массового члена (пропорционального $1/\tau_{\text{so}}$) в знаменателе диффузионных пропагаторов (A.18). Соответствующие моды будут подавлены в диффузионном пределе. Другими словами, в приведенных выше уравнениях j учитывает только бесцелевые моды, т.е. $j = 0$ при $\mathcal{N} = 0$ и $j = 0, 3$ при $\mathcal{N} = 1$.

Итак, теперь у нас все готово для изучения влияния флуктуаций Q на классическое действие. В низшем порядке по беспорядку аппроксимируем Q как $Q \simeq \underline{Q} + R^{-1}WR$. Это дает следующую флуктуационную поправку от взаимодействующей части действия (в канале часица-дырка):

$$\begin{aligned} S_{\text{int}}^{(\rho)} + S_{\text{int}}^{(\sigma)} & \rightarrow \\ & \rightarrow -\frac{\pi T}{4} \int_{\mathbf{r}} \sum_{\alpha, n} \sum_{r=0,3} \sum_j \Gamma_j \langle \text{Tr}[RI_n^\alpha t_{rj} R^{-1}W] \times \\ & \times \text{Tr}[RI_{-n}^\alpha t_{rj} R^{-1}W] \rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.19})$$

Здесь и далее суммирование идет по $j = 0$ при $\mathcal{N} = 0$ и по $j = 0, 3$ при $\mathcal{N} = 1$. Учитывая выражение для пропагаторов (A.18), получаем (подробности см. в [29])

$$\begin{aligned} S_{\text{int}}^{(\rho)} + S_{\text{int}}^{(\sigma)} & \rightarrow \frac{32\pi T N_r V}{g} (\Gamma_s - \mathcal{N}\Gamma_t) \times \\ & \times \sum_{\varepsilon, \varepsilon' > 0} \sin \theta_\varepsilon \sin \theta_{\varepsilon'} \int_q \mathcal{D}_q(i\varepsilon, -i\varepsilon'), \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

где

$$\int_q \equiv \int d^2 \mathbf{q} / (2\pi)^2.$$

В свою очередь взаимодействие в куперовском канале перенормируется следующим образом

$$\hat{S}_{\text{int}}^{(c)} \rightarrow -\frac{32\pi T \Gamma_c N_r}{g} \sum_{\varepsilon > 0} \mathcal{D}_{q=0}(i\varepsilon, -i\varepsilon) \sin^2 \theta_\varepsilon. \quad (\text{A.21})$$

В совокупности уравнения (A.20) и (A.21) дают следующее модифицированное действие

$$\begin{aligned} S[Q] & \rightarrow \\ & \rightarrow 16\pi T Z_\omega N_r V \left\{ \frac{\Delta^2}{4\pi T \gamma_c} + \sum_{\varepsilon > 0} [\varepsilon \cos \theta_\varepsilon + \Delta \sin \theta_\varepsilon] + \right. \\ & \left. + \frac{2\pi T (\gamma_s - \mathcal{N}\gamma_t)}{g} \times \right. \\ & \left. \times \sum_{\varepsilon, \varepsilon' > 0} \sin \theta_\varepsilon \sin \theta_{\varepsilon'} \int_q \mathcal{D}_q(i\varepsilon, -i\varepsilon') \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.22})$$

Наконец, вариация уравнения (A.22) относительно θ_ε и Δ приводит к уравнениям (1) и (2), соответственно.

ПРИЛОЖЕНИЕ В

В данном приложении приведена оценка критической температуры T_c с помощью уравнений ренормализационной группы, описывающих перенормировку удельного сопротивления и взаимодействий в нормальной фазе. Полный набор однопеллевых ренормгрупповых уравнений (в низшем порядке по беспорядку) был получен из перенормировки нелинейной сигма-модели Финкельштейна с помощью фонового поля, см. уравнения (47)–(51), в работе [23]. Разлагая эти уравнения по $|\gamma_{s,t,c}| \ll 1$ и выбирая $\mathcal{N} = 1$, находим

$$\frac{dt}{dy} = -t^2(\gamma_s + \gamma_t + 2\gamma_c)/2, \quad (\text{B.1a})$$

$$\frac{d}{dy} \begin{pmatrix} \gamma_s \\ \gamma_t \\ \gamma_c \end{pmatrix} = \quad (\text{B.1b})$$

$$= -\frac{t}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & -2 \\ 1 & -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_s \\ \gamma_t \\ \gamma_c \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 2\gamma_c^2 \end{pmatrix}. \quad (\text{B.1c})$$

Из уравнения (B.1a) следует, что безразмерное сопротивление t остается постоянным и равно сво-

ему затравочному значению t_0 . Проецируя систему (В.1с) на линию БКШ $-\gamma_s = \gamma_t = \gamma_c = \gamma$, получаем

$$\frac{d\gamma}{dy} = t_0\gamma - \gamma^2, \quad (\text{В.2})$$

$$\gamma_0 = (\gamma_{t0} - \gamma_{s0} + 2\gamma_{c0})/4 < 0.$$

Решив это уравнение, находим, что ренормгрупповой поток расходится при $y_c = t_0^{-1} \ln(1 + t_0/|\gamma_0|)$. При $|\gamma_0| \ll t_0 \ll 1$ мы наблюдаем значительное усиление сверхпроводимости, $T_c \sim (1/\tau)e^{-2y_c}$, см. уравнение (8). Отметим, что при $|\gamma_0| \ll t_0 \ll 1$ притягивающее взаимодействие γ достигает значения t_0 на масштабе длины $y_c - \ln 2$ и затем очень быстро расходится.

Таким же образом разберем случай $\mathcal{N} = 0$. Сильное спин-орбитальное взаимодействие полностью подавляет все триплетные моды, а уравнения для взаимодействий γ_s , γ_c и удельного сопротивления t имеют вид

$$\frac{dt}{dy} = -t^2/2, \quad (\text{В.3а})$$

$$\frac{d}{dy} \begin{pmatrix} \gamma_s \\ \gamma_c \end{pmatrix} = -\frac{t}{2} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \gamma_s \\ \gamma_c \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 \\ 2\gamma_c^2 \end{pmatrix}. \quad (\text{В.3б})$$

Проекция этой системы на линию БКШ $-\gamma_s = \gamma_c = \gamma$ дает

$$\frac{d\gamma}{dy} = (t/2)\gamma - (4/3)\gamma^2, \quad (\text{В.4})$$

$$\gamma_0 = (2\gamma_{c0} - \gamma_{s0})/3 < 0.$$

Аналогично рассмотренному выше случаю в режиме $|\gamma_0| \ll t_0 \ll 1$ $|\gamma|$ растет с увеличением y и достигает t . После этого $|\gamma|$ очень быстро расходится на масштабе $y_c \sim 1/\sqrt{|\gamma_0|t_0}$. Ему соответствует критическая температура $T_c \sim (1/\tau)e^{-2y_c}$, см. уравнение (34).

ПРИЛОЖЕНИЕ С

В данном приложении приведены некоторые детали численного вычисления критической температуры с помощью степенного метода и размерной подгонки.

Как упоминалось в основном тексте, линеаризованное уравнение самосогласования (9) можно рассматривать как задачу о нахождении старшего собственного значения. Однако трудность с численной точки зрения заключается в том, что матрицы, определенные в уравнениях (10) и (36) имеют параметрически большую размерность. Действительно, $n_{\max} \simeq 1/2\pi\tau T_c$ дает $n_{\max} \propto (t_0/|\gamma_0|)^{2/t_0} \gg 1$ для

$\mathcal{N} = 1$ и $n_{\max} \propto \exp(4/t_c - 4/t_0) \gg 1$ при $\mathcal{N} = 0$. Ниже мы рассмотрим оба случая по отдельности.

В случае изинговского спин-орбитального взаимодействия мы подгоняем ведущий собственный вектор выражением

$$\lambda_M = c_1/t_0 + c_2, \quad (\text{С.1})$$

где c_1 и c_2 — подгоночные параметры. Такое выражение оправдано следующей аналитической оценкой:

$$\begin{aligned} \lambda_M &= \sum_{n' \geq 0}^{n_{\max}} \frac{\Delta_{n'}/\Delta_0}{(n'+1)^{t_0/2}(n'+1/2)} \simeq \\ &\simeq \frac{2}{t_0} \int_{u_\infty}^{u_0} \frac{du}{u} f(u) + c_2 = c_1/t_0 + c_2. \end{aligned} \quad (\text{С.2})$$

Она показывает функциональную зависимость старшего собственного значения λ_M от параметра $t_0 \ll 1$. В приведенном выше выражении мы использовали асимптотическое выражение для правого собственного вектора r_n в виде $r_n = f(u_n)$ и заменили $(n+n'+1)$ на $\max\{(n+1/2)^{t_0/2}, (n'+1/2)^{t_0/2}\}$, что оправдывается малостью параметра t_0 и дает поправку порядка $O(t_0)$. Сопоставляя численные результаты с аналитическим выражением (С.1), мы получаем $c_1 \approx 1.38$ и $c_2 \approx 1.50$, что приводит к ответу (11).

Следует отметить, что $\lambda_M \approx 1.38/t_0$ лежит в пределах неравенства Перрона – Фробениуса,

$$\lambda_M \leq \max_n \sum_{n'=0}^{n_{\max}} M_{nn'} \simeq \frac{2}{t_0}. \quad (\text{С.3})$$

Далее мы переходим к случаю $\mathcal{N} = 0$. Сильное спин-орбитальное взаимодействие соответствует матрице $M_{nn'}(\ln n_{\max})$. Снова можно найти функциональную зависимость λ_M от размера матрицы n_{\max} с помощью приближения $\ln(n+n'+1) \rightarrow \ln(\max\{n+1/2, n'+1/2\})$,

$$\begin{aligned} \lambda_M &= \sum_{n' \geq 0}^{n_{\max}} \frac{\ln(n_{\max}) - \ln(n'+1)}{n'+1/2} \frac{\Delta_{n'}}{\Delta_0} \simeq \\ &\simeq \int_{u_\infty}^{u_0} du u f(u) + c_2 \ln n_{\max}. \end{aligned} \quad (\text{С.4})$$

С помощью уравнений (39) и (42), а также используя $\pi^2/(|\gamma_0|t_0) = \ln^2 n_{\max}$, получаем следующую размерную подгонку:

$$\lambda_M = c_1 \ln^2 n_{\max} + c_2 \ln n_{\max}. \quad (\text{С.5})$$

Используя приведенное выше выражение для фитирования численных данных, получаем $c_1 \approx 0.406$, $c_2 \approx 1.57$. Аналогично предыдущему случаю, можно проверить, что $c_1 = 0.406$ удовлетворяет неравенству Перрона-Фробениуса,

$$\lambda_M \leq \max_n \sum_{n'=0}^{n_{\max}} M_{nn'} (\ln n_{\max}) \simeq \frac{\ln^2 n_{\max}}{2}. \quad (\text{C.6})$$

ПРИЛОЖЕНИЕ D

В данном приложении обсуждаются детали нахождения усредненной по беспорядку парной корреляционной функции локальной плотности состояний. В рамках нашего подхода мезоскопические флуктуации локальной плотности состояний могут быть выражены через Q -матрицы следующим образом (см. [65, 66]):

$$\begin{aligned} K_2(E, E', \mathbf{r}) &= \langle \delta\rho(E, \mathbf{r}) \delta\rho(E', \mathbf{r}) \rangle = \\ &= \langle \rho(E, \mathbf{r}) \rho(E', \mathbf{r}) \rangle - \langle \rho(E, \mathbf{r}) \rangle \langle \rho(E', \mathbf{r}) \rangle = \\ &= \frac{\nu^2}{32} \text{Re} [P_{2,irr}^{\alpha_1\alpha_2}(i\varepsilon_1, i\varepsilon_3) - P_{2,irr}^{\alpha_1\alpha_2}(i\varepsilon_1, i\varepsilon_4)]. \end{aligned} \quad (\text{D.1})$$

Здесь $\alpha_1 \neq \alpha_2$ — некоторые фиксированные репличные индексы, и предполагается аналитическое продолжение согласно $i\varepsilon_{n_1} \rightarrow E + i0$, $i\varepsilon_{n_3} \rightarrow E' + i0$, $i\varepsilon_{n_4} \rightarrow E' - i0$. $P_{2,irr}^{\alpha_1\alpha_2}(i\varepsilon_n, i\varepsilon_m)$ — неприводимая часть билинейного по Q оператора:

$$P_2^{\alpha_1\alpha_2} = \langle \text{sp} Q_{nn}^{\alpha_1\alpha_1} \text{sp} Q_{mm}^{\alpha_2\alpha_2} - 2 \text{sp} Q_{nm}^{\alpha_1\alpha_2} Q_{mn}^{\alpha_2\alpha_1} \rangle. \quad (\text{D.2})$$

Чтобы найти мезоскопические флуктуации локальной плотности состояний, аппроксимируем $P_{2,irr}^{\alpha_1\alpha_2}(i\varepsilon_n, i\varepsilon_m)$ с помощью

$$P_{2,irr}^{\alpha_1\alpha_2} \simeq -2 \text{sp} \langle (R^{-1}WR)_{nm}^{\alpha_1\alpha_2} (R^{-1}WR)_{mn}^{\alpha_2\alpha_1} \rangle. \quad (\text{D.3})$$

Используя уравнение (A.18), находим

$$\begin{aligned} P_2(i\varepsilon, i\varepsilon') &= \\ &= -\frac{32(1+\mathcal{N})}{g} \left[1 - \frac{\varepsilon}{\sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2}} \frac{\varepsilon'}{\sqrt{\varepsilon'^2 + \Delta^2}} \right] \times \\ &\times \int \frac{d^2\mathbf{q}}{(2\pi)^2} \frac{D}{Dq^2 + \sqrt{\varepsilon^2 + \Delta^2} + \sqrt{\varepsilon'^2 + \Delta^2}}, \end{aligned} \quad (\text{D.4})$$

которое верно для любых знаков ε и ε' . Отметим, что это выражение справедливо только при условии (51), когда зависимостью спектральной щели Δ_ε от энергии можно пренебречь. Тогда для

$K_2(E, E', \mathbf{r})$, где $E, E' \gg \Delta$, находим следующее выражение:

$$\begin{aligned} K_2 &= \frac{\nu^2(1+\mathcal{N})}{g} \sum_{s=\pm} s \left(1 + \frac{sEE'}{\sqrt{E^2 - \Delta^2}\sqrt{E'^2 - \Delta^2}} \right) \times \\ &\times \text{Re} \int \frac{D}{Dq^2 + i\sqrt{E^2 - \Delta^2} - is\sqrt{E'^2 - \Delta^2}}. \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

Ясно, что когда $E = E'$, мы получаем уравнение (52).

Перейдем к мезоскопическим флуктуациям локальной плотности состояний на различных энергиях $E \neq E'$. Прежде всего отметим, что когда E и E' близки, парная корреляционная функция $K_2(E, E', \mathbf{r})$ слабо отличается от $K_2(E, E, \mathbf{r})$. Поэтому особый интерес представляет случай, когда энергии разнесены далеко друг от друга. Предположим, что $E' = E + \omega$, где ω велико по сравнению с E . Тогда, разложив (D.5) по малому аргументу $E/\omega \ll 1$ и проинтегрировав по импульсу \mathbf{q} , получим уравнение (55).

ЛИТЕРАТУРА

1. A. A. Abrikosov and L. P. Gor'kov, Sov. Phys. JETP **8**, 1090 (1959).
2. A. A. Abrikosov and L. P. Gor'kov, Sov. Phys. JETP **9**, 220 (1959).
3. P. W. Anderson, J. Phys. Chem. Solids **11**, 26 (1959).
4. P. W. Anderson, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958).
5. L. N. Bulaevskii and M. V. Sadovskii, JETP Lett. **39**, 640 (1984).
6. M. Ma and P. A. Lee, Phys. Rev. B **32**, 5658 (1985).
7. A. Kapitulnik and G. Kotliar, Phys. Rev. Lett. **54**, 473 (1985).
8. G. Kotliar and A. Kapitulnik, Phys. Rev. B **33**, 3146 (1986).
9. S. Maekawa and H. Fukuyama, J. Phys. Soc. Jpn. **51**, 1380 (1982).
10. H. Takagi and Y. Kuroda, Solid State Comm. **41**, 643 (1982).
11. S. Maekawa, H. Ebisawa, and H. Fukuyama, J. Phys. Soc. Jpn. **53**, 2681 (1984).
12. P. W. Anderson, K. A. Muttalib, and T. V. Ramakrishnan, Phys. Rev. B **28**, 117 (1983).

13. L. N. Bulaevskii and M. V. Sadovskii, *J. Low Temp. Phys.* **59**, 89 (1985).
14. A. M. Finkel'stein, *JETP Lett.* **45**, 46 (1987).
15. A. M. Finkel'stein, *Physica B* **197**, 636 (1994).
16. D. B. Haviland, Y. Liu, and A. M. Goldman, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 2180 (1989).
17. A. M. Goldman and N. Marković, *Phys. Today* **51**, 39 (1998).
18. V. F. Gantmakher and V. T. Dolgoplov, *Physics-Uspokhi* **53**, 1 (2010).
19. B. Sacépé, M. Feigel'man, T. M. Klapwijk, *Nat. Phys.* **16**, 734 (2020).
20. M. V. Feigel'man, L. B. Ioffe, V. E. Kravtsov, and E. A. Yuzbashyan, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 027001 (2007).
21. M. V. Feigel'man, L. B. Ioffe, V. E. Kravtsov, and E. Cuevas, *Ann. Phys.* **325**, 1390 (2010).
22. I. S. Burmistrov, I. V. Gornyi, A. D. Mirlin, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 017002 (2012).
23. I. S. Burmistrov, I. V. Gornyi, and A. D. Mirlin, *Phys. Rev. B* **92**, 014506 (2015).
24. M. N. Gastiasoro and B. M. Andersen, *Phys. Rev. B* **98**, 184510 (2018).
25. B. Fan and A. M. García-García, *Phys. Rev. B* **101**, 104509 (2020).
26. M. Stosiek, B. Lang, and F. Evers, *Phys. Rev. B* **101**, 144503 (2020).
27. K. Zhao, H. Lin, X. Xiao, W. Huang, W. Yao, M. Yan, Y. Xing, Q. Zhang, Z.-X. Li, S. Hoshino, J. Wang, S. Zhou, L. Gu, M. S. Bahramy, H. Yao, N. Nagaosa, Q.-K. Xue, K. T. Law, X. Chen, and S.-H. Ji, *Nat. Phys.* **15**, 904 (2019).
28. C. Rubio-Verdú, A. M. García-García, H. Ryu, D.-J. Choi, J. Zaldívar, S. Tang, B. Fan, Z.-X. Shen, S.-K. Mo, J. I. Pascual, and M. M. Ugeda, *Nano Lett.* **20**, 5111 (2020).
29. I. S. Burmistrov, I. V. Gornyi, and A. D. Mirlin, *Ann. Phys. (N. Y.)* **435**, 168499 (2021).
30. M. Stosiek, F. Evers, and I. S. Burmistrov, *Phys. Rev. Research* **3**, L042016 (2021).
31. B. Sacépé, C. Chapelier, T. I. Baturina, V. M. Vinokur, M. R. Baklanov, and M. Sanquer, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 157006 (2008).
32. B. Sacépé, C. Chapelier, T. I. Baturina, V. M. Vinokur, M. R. Baklanov, and M. Sanquer, *Nat. Commun.* **1**, 140 (2010).
33. B. Sacépé, Th. Dubouchet, C. Chapelier, M. Sanquer, M. Ovadia, D. Shahar, M. Feigel'man, and L. Ioffe, *Nat. Phys.* **7**, 239 (2011).
34. D. Sherman, B. Gorshunov, S. Poran, N. Trivedi, E. Farber, M. Dressel, and A. Frydman, *Phys. Rev. B* **89**, 035149 (2014).
35. M. Mondal, A. Kamlapure, M. Chand, G. Saraswat, S. Kumar, J. Jesudasan, L. Benfatto, V. Tripathi, and P. Raychaudhuri, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 047001 (2011).
36. Y. Noat, V. Cherkez, C. Brun, T. Cren, C. Carbillet, F. Debontridder, K. Ilin, M. Siegel, A. Semenov, H.-W. Hübers, and D. Roditchev, *Phys. Rev. B* **88**, 014503 (2013).
37. I. S. Burmistrov, I. V. Gornyi, and A. D. Mirlin, *Phys. Rev. B* **93**, 205432 (2016).
38. C. Brun, T. Cren, V. Cherkez, F. Debontridder, S. Pons, L. B. Ioffe, B. L. Altshuler, D. Fokin, M. C. Tringides, S. Bozhko, and D. Roditchev, *Nat. Phys.* **10**, 444 (2014).
39. M. Kim, Y. Kozuka, C. Bell, Y. Hikita, and H. Y. Hwang, *Phys. Rev. B* **86**, 085121 (2012).
40. K. Ueno, T. Nojima, S. Yonezawa, M. Kawasaki, Y. Iwasa, and Y. Maeno, *Phys. Rev. B* **89**, 020508(R) (2014).
41. A. D. Caviglia, S. Gariglio, N. Reyren, D. Jaccard, T. Schneider, M. Gabay, S. Thiel, G. Hammerl, J. Mannhart, and J.-M. Triscone, *Nature* **456**, 624 (2008).
42. J. A. Sulpizio, S. Ilani, P. Irvin, and J. Levy, *Annu. Rev. Mater. Res.* **44**, 117 (2014).
43. J. T. Ye, Y. J. Zhang, R. Akashi, M. S. Bahramy, R. Arita, and Y. Iwasa, *Science* **338**, 1193 (2012).
44. J. T. Ye, Y. J. Zhang, M. Yoshida, Y. Saito, and Y. Iwasa, *J. Supercond. Nov. Magn.* **27**, 981 (2014).
45. K. Taniguchi, A. Matsumoto, H. Shimotani, and H. Takagi, *Appl. Phys. Lett.* **101**, 042603 (2012).
46. K. D. Usadel, *Phys. Rev. Lett.* **25**, 507 (1970).
47. M. A. Skvortsov and M. V. Feigel'man, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 057002 (2005).
48. M. V. Feigel'man and M. A. Skvortsov, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 147002 (2012).

49. P. A. Lee, *J. Non-Cryst. Solids*, **35**, 21 (1980).
50. T. P. Devereaux and D. Belitz, *Phys. Rev. B* **44**, 4587 (1991)
51. W. Brenig, M.-Ch. Chang, E. Abrahams, and P. Wölfle *Phys. Rev. B* **31**, 7001 (1985).
52. Y. L. Loh, M. Randeria, N. Trivedi, Ch.-Ch. Chang, and R. Scalettar, *Phys. Rev. X* **6**, 021029 (2016).
53. M. Yu. Kagan, E. A. Mazur, *JETP* **159**, 696 (2021).
54. A. Abanov, A. V. Chubukov, *Phys. Rev. B* **102**, 024524 (2020).
55. Y. Wu, A. Abanov, Y. Wang, A. V. Chubukov, *Phys. Rev. B* **102**, 024525 (2020).
56. Y.-M. Wu, A. Abanov, A. V. Chubukov, *Phys. Rev. B* **102**, 094516 (2020).
57. Y.-M. Wu, Sh.-Sh. Zhang, A. Abanov, A. V. Chubukov, *Phys. Rev. B* **103**, 024522 (2021).
58. Y.-M. Wu, Sh.-Sh. Zhang, A. Abanov, A. V. Chubukov, *Phys. Rev. B* **103**, 184508 (2021).
59. Y.-M. Wu, Sh.-Sh. Zhang, A. Abanov, A. V. Chubukov, *Phys. Rev. B* **104**, 144509 (2021).
60. P. A. Nosov, I. S. Burmistrov, and S. Raghu, *Phys. Rev. Lett.* **125**, 256604 (2020).
61. T. Ch. Wu, Y. Liao, M. S. Foster, arXiv:2206.01762.
62. E. J. König, A. Levchenko, I. V. Protopopov, I. V. Gornyi, I. S. Burmistrov, and A. D. Mirlin, *Phys. Rev. B* **92**, 214503 (2015).
63. E. J. König, I. V. Protopopov, A. Levchenko, I. V. Gornyi, and A. D. Mirlin, *Phys. Rev. B* **104**, 100507 (2021).
64. M. R. Beasley, J. E. Mooij, and T. P. Orlando, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 1165 (1979).
65. I. S. Burmistrov, I. V. Gornyi, and A. D. Mirlin, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 066601 (2013).
66. I. S. Burmistrov, I. V. Gornyi, and A. D. Mirlin, *Phys. Rev. B* **91**, 085427 (2015).
67. A. M. Finkel'stein, *Electron Liquid in Disordered Conductors*, vol. 14 of Soviet Scientific Reviews, ed. by I. M. Khalatnikov, Harwood Academic Publishers, London, (1990).
68. D. Belitz and T. R. Kirkpatrick, *The Anderson-Mott transition*, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 261 (1994).
69. I. S. Burmistrov, *JETP*, **129**, 669 (2019).

ОСОБЕННОСТИ ФИЗИЧЕСКИХ НАБЛЮДАЕМЫХ СИЛЬНО КОРРЕЛИРОВАННОЙ СВЕРХПРОВОДЯЩЕЙ НАНОПРОВОЛОКИ СО СПИН-ОРБИТАЛЬНЫМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ РАШБА

*М. С. Шустин**, *С. В. Аксенов***

*Институт физики им. Л. В. Киренского Сибирского отделения Российской академии наук
660036, Красноярск, Россия*

Поступила в редакцию 04 декабря 2021 г.,
после переработки 28 января 2022 г.
Принята к публикации 28 января 2022 г.

Исследовано поведение калорических характеристик и электронной компоненты спиновой поляризации возбуждений в режиме сильных электронных корреляций нанопроволоки, которая характеризуется наведенной сверхпроводимостью расширенного s -типа симметрии, спин-орбитальным взаимодействием Рашба и зеemanовским расщеплением одноузельных уровней. Проблема анализировалась на основе метода ренормгруппы для матрицы плотности. Показано, что для однозначной идентификации различных фаз системы — топологически тривиальной с краевыми возбуждениями или без них, а также топологически нетривиальных фаз с одной или несколькими парами майорановских мод — недостаточно анализировать по отдельности каждую из упомянутых характеристик, а необходимо рассматривать их особенности совместно.

Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 95-летию Э. И. Рашба

DOI: 10.31857/S0044451022100108

EDN: JTNPAF

1. ВВЕДЕНИЕ

Майорановские моды (ММ) в низкоразмерных сверхпроводниках были предсказаны около 20 лет назад для моделей двумерных [1] и одномерных [2] невзаимодействующих электронных систем с нетривиальным сверхпроводящим спариванием. Такие моды характеризуются нулевой энергией возбуждения и пространственной нелокальностью: одно майорановское связанное состояние (МСС), которое представляет собой фермиевское возбуждение, можно условно представить в виде двух ММ с перекрывающимися волновыми функциями. В низкоразмерных системах ММ могут быть локализованы на краях или неоднородностях квантовых проволок [3, 4], неоднородностях (вихрях) сверхпроводящего параметра порядка или углах двумерных систем [4, 5]. Было показано, что фазы с отсутстви-

ем или наличием ММ могут быть классифицированы топологическими методами (топологические фазы — ТФ), а потому сверхпроводящие материалы, в которых реализуются состояния с нулевой энергией и пространственной нелокальностью называются топологическими сверхпроводниками. При этом нелокальная структура майорановских квазичастиц является причиной их устойчивости к локальным внешним возмущениям и обуславливает топологическую защищенность этих состояний. Более того, изменение пространственного положения ММ в двумерных системах может приводить к изменениям волновой функции основного состояния системы, не сводящимся к умножению её на глобальный фазовый множитель [6]. Отмеченные особенности обуславливают значительный интерес к твердотельным системам с ММ как к материалам перспективным для реализации квантовых вычислений.

В настоящее время исследование топологических сверхпроводников превратилось в обширное и активно развиваемое направление физики конденсированного состояния (см., например, работы [7–10] и цитируемую в них литературу). Начиная с модели

* E-mail: mshustin@yandex.ru

** E-mail: asv86@iph.krasn.ru

Китаева, было известно, что для реализации нетривиальных фаз и ММ важную роль играет сверхпроводящее спаривание электронов с одинаковыми проекциями спинового момента, т.е. триплетное спаривание [2]. Поскольку имеется ограниченное количество кандидатов в триплетные сверхпроводники (Sr_2RuO_4 , UGe_2 , UCoGe , URhGe [11–16]), важным оказался поиск условий, при которых такой механизм спаривания может эффективно реализовываться в более распространенных синглетных сверхпроводниках.

В работах [17, 18] впервые было показано, что для возникновения спаривания p -типа и ММ в одномерных системах необходимо одновременное присутствие спин-орбитальной связи Рашба и магнитного поля. Эти результаты послужили триггером для синтеза и экспериментального исследования гибридных структур типа традиционный сверхпроводник/полупроводник с сильным спин-орбитальным взаимодействием [19, 20]. В частности, изучены транспортные свойства полупроводниковых нанопроволок InAs или InSb , на поверхность которых эпитаксиальным образом напылялся слой Al [21–23]. В отмеченных гетероструктурах наблюдался квантованный пик дифференциальной проводимости при нулевом напряжении, сохраняющийся в некотором диапазоне магнитных полей и электростатических полей электродов затвора. В дополнение к этому были синтезированы и экспериментально исследованы гибридные структуры Al-EuS-InAs с тонким слоем ферромагнетика EuS [24]. Наличие контакта ферромагнетика со сверхпроводящей нанопроволокой позволило индуцировать в последней ближний магнитный порядок и наблюдать квантованный пик дифференциальной проводимости в отсутствие внешнего магнитного поля, которое оказывает негативное воздействие на сверхпроводимость и соответствующий эффект близости.

Возникновение стабильного квантованного пика кондактанса связывалось с реализацией в системе МСС, хотя относительно верности данной трактовки до настоящего времени ведутся дискуссии (см., например, [25–27]). Интерпретацию экспериментальных данных может усложнить также и то, что для нанопроволок InAs были проведены экспериментальные исследования, указывающие на возможную реализацию в них режима сильных электронных корреляций (СЭК) [28].

Таким образом, в настоящее время приобрел актуальность поиск наблюдаемых характеристик сверхпроводящих нанопроволок, позволяющий идентифицировать топологические фазовые пере-

ходы и МСС в том числе в режиме СЭК. Данный вопрос рассматривался в работах [29–34] в рамках модели цепочки Китаева с использованием метода ренормгруппы для матрицы плотности (density matrix renormalization group — DMRG) [35–38]. Обсуждались два типа критериев. Первый из них основывался на использовании характеристик спектра и собственных состояний многочастичной системы: вырождение многочастичной энергии основного состояния (для секторов гильбертова пространства с различной фермионной четностью), вырождение спектра редуцированной многочастичной матрицы плотности и асимптотическое поведение свойств одночастичной матрицы плотности на больших расстояниях [30–34]. Формулировка второго типа критериев связывалась с наблюдаемыми характеристиками: возникновением максимума спектральной функции (которая определяет поведение дифференциальной проводимости) на нулевой частоте [29], аномальным поведением сжимаемости и восприимчивости [30, 31].

Исследования возможностей детектирования ТФ проводились также в рамках модели сверхпроводящей нанопроволоки (СП) со спин-орбитальным взаимодействием Рашба и зеемановским расщеплением (см. разд. 2), которая активно используется при интерпретации экспериментальных данных для гибридных структур Al-InAs и Al-EuS-InAs . Так, были предсказаны особенности поведения калорическими функций [39] и свойств резонансов Фано [40], позволяющие предсказывать условия реализации ТФ в коротких нанопроволоках. Также рассматривались перспективы детектирования МСС на основе анализа их спиновой поляризации [41–45]. Однако отмеченные исследования проводились либо при учете слабых электрон-электронных взаимодействий [39, 40], либо в пренебрежении ими [41–45].

В настоящей работе в рамках модели СП со спин-орбитальным взаимодействием Рашба и зеемановским расщеплением анализируется возможность экспериментального детектирования ТФ в условиях сильного хаббардовского отталкивания. Первые результаты анализа данной проблемы, полученные на основе метода DMRG, обсуждались в работе [46]. В частности, отмечалось, что одних только особенностей поведения магнитно- и электрокалорических эффектов недостаточно для определения типа ТФ. В данной статье демонстрируется, что для решения этой проблемы необходимо совместно анализировать особенности калорических функций и спиновой поляризации возбуждений.

2. МОДЕЛЬ ГИБРИДНОЙ НАНОПРОВОЛОКИ

Полупроводниковую нанопроволоку InAs, на поверхность которой эпитаксиальным образом напылены тонкие слои (3-5 нм) Al и EuS, ответственные за индуцирование наведенной сверхпроводимости и ближнего магнитного порядка (в последнем случае, как указывалось в разд. 1, аналогичный эффект может быть достигнут действием внешнего магнитного поля), будем моделировать в рамках следующего гамильтониана в приближении сильной связи [46, 47]:

$$\begin{aligned} \hat{H}_W = & \sum_{f\sigma} \xi_\sigma \hat{a}_{f\sigma}^\dagger \hat{a}_{f\sigma} + U \sum_f \hat{n}_{f\uparrow} \hat{n}_{f\downarrow} - \\ & - \sum_{f\sigma} \left(\frac{t}{2} \hat{a}_{f\sigma}^\dagger \hat{a}_{f+1\sigma} + \frac{\alpha}{2} \eta_\sigma \hat{a}_{f\sigma}^\dagger \hat{a}_{f+1\bar{\sigma}} + \text{H. c.} \right) + \\ & + \sum_f [\Delta \hat{a}_{f\uparrow} \hat{a}_{f\downarrow} + \Delta_1 (\hat{a}_{f\uparrow} \hat{a}_{f+1\downarrow} + \hat{a}_{f+1\uparrow} \hat{a}_{f\downarrow}) + \\ & + \text{H. c.}]. \quad (1) \end{aligned}$$

Здесь слагаемые первых двух строк описывают одномерную систему фермионов с интегралом перескока t ; параметром спин-орбитального взаимодействия Рашба α ; а также зависящую от проекции спина энергию фермиона на одном узле (отсчитанную от химического потенциала μ),

$$\xi_\sigma = -\mu - \eta_\sigma h, \quad h = \frac{1}{2} g \mu_B H,$$

где g — фактор Ланде, μ_B — магнетон Бора, H — эффективное магнитное поле, сформированное внешним магнитным полем и/или наведенным магнетизмом от слоя EuS. Оператор $\hat{a}_{f\sigma}$ ($\hat{a}_{f\sigma}^\dagger$) описывает уничтожение (рождение) фермиона на узле с номером f и проекцией спина $\sigma = \uparrow, \downarrow$, $\eta_\uparrow = 1$, $\eta_\downarrow = -1$. Второе слагаемое гамильтониана соответствует учету одноузельного (хаббардовского) кулоновского взаимодействия фермионов с амплитудой U . Оператор числа электронов на узле $\hat{n}_{f\sigma} = \hat{a}_{f\sigma}^\dagger \hat{a}_{f\sigma}$. В четвертом слагаемом гамильтониана представлены слагаемые, связанные с наличием (за счет эффекта близости) потенциала сверхпроводящего спаривания расширенного s -типа симметрии с амплитудами Δ и Δ_1 . В настоящей работе все параметры модели (1) считаются действительными и принимается, что $h > 0$. Также учет электрон-электронных взаимодействий будет проводиться как в режиме слабых $U < t/2$, так и сильных $U \gg t/2$ электронных корреляций (СЭК). При этом под слабыми электронными корреляциями мы понимаем режим, при котором система

может быть с хорошей точностью описана в приближении самосогласованного среднего поля (ССП, см. [39, 40]).

3. РОЛЬ СПИН-ОРБИТАЛЬНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ РАШБА В РЕАЛИЗАЦИИ МАЙОРАНОВСКИХ КВАЗИЧАСТИЦ

Остановимся подробнее на роли, которую играет спин-орбитальная связь Рашба в формировании МСС. Наиболее общим обоснованием важности такого взаимодействия является симметричный аргумент. Так, строгая одномерность модели и сверхпроводящие спаривания приводят к реализации эффективной симметрии по отношению к инверсии времени, а также электрон-дырочной симметрии, соответственно. Если бы в системе не было спин-орбитального взаимодействия Рашба, то такой набор симметрий соответствовал бы классу C в классификации Алтланда–Цирнбауэра неупорядоченных гамильтонианов без взаимодействия [48–50]. При этом, согласно топологической классификации таких гамильтонианов [51–53], 1D-ансамбль фермионов класса C не может реализовывать топологически нетривиальные фазы. Наличие в модели (1) спин-орбитального взаимодействия Рашба нарушает в системе вращательную инвариантность в спиновом пространстве и понижает симметрию гамильтониана до класса BDI. Последний допускает реализацию топологически нетривиальных фазовых состояний и классифицируется посредством целочисленного инварианта $N_{BDI} \in \mathbb{Z}$ (см. разд. 4). Ранее нами было показано [46], что в системе (1) могут реализовываться ТФ с $-2 \leq N_{BDI} \leq 2$, причем такие фазы реализуются как в режиме слабых, так и сильных электронных корреляций. При этом $|N_{BDI}|$ соответствует количеству МСС, имеющихся в нанопроволоке в данной фазе.

Второй аргумент связан с количеством ферми-точек в одномерных моделях в интервале квазиимпульсов $k \in [0; \pi]$. В работе [2] было продемонстрировано, что топологически нетривиальная фаза в одномерном бесспиновом сверхпроводнике реализуется, если в нормальном состоянии система имеет нечетное число ферми-точек на половине зоны Бриллюэна. Учет спиновых степеней свободы в общем случае означает двукратное вырождение состояний, усложняя тем самым наблюдение таких фаз. Однако, как было показано в статьях [17, 18], совместное действие зеемановского расщепления и спин-орбитального взаимодействия

Рашба в отсутствие сверхпроводящего спаривания приводит к двухзонному спектру со щелью при $k = 0$. В результате, если μ находится внутри этой щели, то имеет место желаемая картина с одной ферми-точкой для $k \in [0; \pi]$. Более того, ниже мы покажем, что без учета хаббардовского отталкивания в режиме сильного зеемановского расщепления СП со спариваниями s -типа фактически ведет себя как p -волновой сверхпроводник в ансамбле бесспиновых фермионов, а гамильтониан(1) сводится к обобщенной модели Китаева [54]. Это позволит не только подчеркнуть важность спин-орбитального взаимодействия Рашба в формировании МСС, но и обосновать ограничение $-2 \leq N_{BDI} \leq 2$ на значения топологического инварианта модели(1).

Запишем гамильтониан (1) при $U = 0$ в квазиимпульсном представлении:

$$\hat{H}_W = \sum_{k\sigma} \xi_{k\sigma} \hat{a}_{k\sigma}^\dagger \hat{a}_{k\sigma} + \sum_k \{i\alpha_k \hat{a}_{k\downarrow}^\dagger \hat{a}_{k\uparrow} + \Delta_k \hat{a}_{k\uparrow} \hat{a}_{-k\downarrow} + \text{H. c.}\}, \quad (2)$$

где $\xi_{k\sigma} = \xi_k - \eta_\sigma h$, $\xi_k = -t \cos k - \mu$, $\alpha_k = \alpha \sin k$, $\Delta_k = \Delta + 2\Delta_1 \cos k$. Введем новые операторы, которые соответствуют фермионам в упомянутых в предыдущем абзаце зонах:

$$\begin{aligned} \hat{d}_k &= \cos \phi_k \cdot \hat{a}_{k\uparrow} + i \operatorname{sign}(\alpha_k) \sin \phi_k \cdot \hat{a}_{k\downarrow}, \\ \hat{p}_k &= \sin \phi_k \cdot \hat{a}_{k\uparrow} - i \operatorname{sign}(\alpha_k) \cos \phi_k \cdot \hat{a}_{k\downarrow}, \\ \cos \phi_k &= \sqrt{(1 + r_k)/2}, \\ \sin \phi_k &= \sqrt{(1 - r_k)/2}, \\ r_k &= h/\sqrt{h^2 + \alpha_k^2}, \end{aligned} \quad (3)$$

и выразим через них \hat{H}_W , записав последний в форме Боголюбова – де Жена:

$$\begin{aligned} \hat{H}_W &= \sum_k \left(\xi_k + \frac{1}{2} \hat{R}_k^\dagger \cdot H_{BG}(k) \hat{R}_k \right), \\ \hat{R}_k^\dagger &= (\hat{d}_k^\dagger, \hat{d}_{-k}, \hat{p}_k^\dagger, \hat{p}_{-k}), \\ H_{BG}(k) &= \begin{pmatrix} \varepsilon_{k-} & iA_k & 0 & -iB_k \\ -iA_k & -\varepsilon_{k-} & iB_k & 0 \\ 0 & -iB_k & \varepsilon_{k+} & -iA_k \\ iB_k & 0 & iA_k & -\varepsilon_{k+} \end{pmatrix}, \\ \varepsilon_{k\mp} &= \xi_k \mp \sqrt{h^2 + \alpha_k^2}, \\ A_k &= \Delta_k \alpha_k / \sqrt{h^2 + \alpha_k^2}, \\ B_k &= P_k \Delta_k h / \sqrt{h^2 + \alpha_k^2}, \end{aligned} \quad (4)$$

где $P_k = \operatorname{sign}(\alpha_k)$. Видно, что в новых переменных гамильтониан СП описывает две фермиевские подсистемы, взаимодействие между которыми определяется параметром B_k . Внутри каждой из них реализуются сверхпроводящие спаривания с симметрией p -типа параметра порядка A_k . Видно, что в спин-поляризованном режиме, когда $h \gg t, \alpha, \Delta_k$, взаимодействие между d - и p -подсистемами по амплитуде превышает взаимодействие внутри подсистем, так как $|A_k| \sim \Delta_k \alpha_k / h$, а $|B_k| \sim |\Delta_k|$. Поэтому целесообразно, вводя новые операторы \hat{d}_k и \hat{p}_k , изменить соотношения интенсивностей взаимодействия внутри и между подсистемами.

Переход к новым квазичастицам проведем посредством унитарного преобразования для матрицы Боголюбова – де Жена $H_{BG}(k)$:

$$H_{BG}(k) \rightarrow \tilde{H}_{BG}(k) = e^{-S_k} H_{BG}(k) e^{S_k} = H_{BG}(k) + [H_{BG}(k), S_k] + \frac{1}{2} [[H_{BG}(k), S_k], S_k] + \dots \quad (5)$$

Выберем матрицу оператора инфинитезимального преобразования S_k в виде

$$S_k = \frac{iB_k}{2\xi_k} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Такой выбор совместно с требованием на унитарность матрицы $\exp(S_k)$ приводит к необходимости рассматривать только режимы низкой или высокой электронной концентрации, $|\mu| \gg t, \alpha_k, \Delta_k$. Действительно, в пренебрежении слагаемыми порядка $O(1/\mu^2)$ получаем, что

$$\begin{aligned} \frac{B_k}{2\xi_k} &= -\frac{\Delta_k}{2\mu} P_k \left(1 + \frac{t \cos k}{\mu}\right)^{-1} \left(1 + \frac{\alpha_k^2}{h^2}\right)^{-1/2} \simeq \\ &\simeq -\frac{\Delta_k}{2\mu} P_k \left(1 - \frac{t \cos k}{\mu}\right) \left(1 - \frac{\alpha_k^2}{2h^2}\right) \simeq -\frac{\Delta_k}{2\mu} P_k, \end{aligned} \quad (7)$$

а потому $e^{-S_k} \cdot e^{S_k} = 1 + O(1/\mu^2)$. Таким образом, мы будем работать фактически в параметрической области $h \approx |\mu| \gg t, \alpha_k, \Delta_k$, а при проведении вычислений пренебрегать слагаемыми порядка $O(1/\mu^2, 1/h^2)$. Тогда, переходя в рассматриваемом приближении к новым операторам,

$$\hat{R}_k^\dagger \rightarrow \hat{R}_k^\dagger = \hat{R}_k e^{S_k} = (\hat{d}_k^\dagger, \hat{d}_{-k}, \hat{p}_k^\dagger, \hat{p}_{-k}), \quad (8)$$

получим гамильтониан нанопроволоки в представлении, позволяющем пренебречь взаимодействием между подсистемами d - и p -фермионов:

$$\hat{H}_W = \frac{N\Delta^2}{2\mu} + \frac{N\Delta_1^2}{\mu} + \sum_k (\hat{H}_k^{(d)} + \hat{H}_k^{(p)}), \quad (9)$$

где

$$\begin{aligned}
\widehat{H}_k^{(d)} &= (-\tilde{\mu} - \tilde{h} - t_d \cos k - t_{1d} \cos 2k) \tilde{d}_k^\dagger \hat{d}_k - \\
&\quad - \frac{i}{2} (\tilde{\Delta}_k \hat{d}_k \hat{d}_{-k} + \text{H. c.}), \\
\widehat{H}_k^{(p)} &= (-\tilde{\mu} + \tilde{h} - t_p \cos k - t_{1p} \cos 2k) \hat{p}_k^\dagger \hat{p}_k + \\
&\quad + \frac{i}{2} (\tilde{\Delta}_k \hat{p}_k \hat{p}_{-k} + \text{H. c.}), \\
\tilde{\mu} &= \mu + \frac{\Delta^2}{2\mu} + \frac{\Delta_1^2}{\mu}, \\
\tilde{h} &= h + \frac{\alpha^2}{4h}, \\
t_{d(p)} &= t - \frac{2\Delta\Delta_1}{\mu}, \\
t_{1d(p)} &= \frac{\Delta_1^2}{\mu} \mp \frac{\alpha^2}{4h}, \\
\tilde{\Delta}_k &= \frac{\alpha\Delta}{h} \sin k + \frac{\alpha\Delta_1}{h} \sin 2k.
\end{aligned} \tag{10}$$

Первые два слагаемых правой части (9) дают поправки к энергии основного состояния многочастичной системы, обусловленные виртуальными процессами рождения и уничтожения куперовских пар затравочных электронов. Операторы $\widehat{H}_k^{(d)}$ и $\widehat{H}_k^{(p)}$ характеризуют спектр одночастичных возбуждений системы над основным состоянием. При этом, если $\mu < 0$ ($\mu > 0$), низкоэнергетические фермиевские возбуждения, представляющие практический интерес, описываются оператором $\widehat{H}_k^{(d)}$ ($\widehat{H}_k^{(p)}$). Фактически такие гамильтонианы представляют собой обобщение гамильтониана цепочки Китаева [2], в котором учитываются дальние перескоки и сверхпроводящие спаривания p -типа. Видно, что амплитуда такого спаривания $\tilde{\Delta}_k$ пропорциональна константе спин-орбитального взаимодействия Рашба α . Более того, поскольку в конечной цепочке Китаева локализация ММ требует наличия достаточно большой сверхпроводящей щели (по сравнению с характерной энергией гибридизации ММ $\varepsilon \sim \exp(-L)$), то реализация МСС в рамках эффективной модели (10) подразумевает необходимость достаточно сильного спин-орбитального взаимодействия Рашба.

Модель (9), (10), как и исходный гамильтониан (1), относится к классу BDI и также допускает существование нескольких пар ММ за счет присутствия дальних взаимодействий. При этом в области применимости теории возмущений число пар ММ для исходной и эффективной моделей должно совпадать. Отсюда можно сразу заключить, что количество пар ММ на противоположных концах нанопроволоки, описываемой эффективной моделью (9), не превышает двух (см. ниже расд. 7). Это легко ви-

деть, если перейти к операторам Майорана в узельном представлении. Тогда в особых точках параметрического пространства на краях проволоки могут возникать до двух неспаренных майорановских фермиона [54]. Последнее качественно обосновывает ограничение $|N_{BDI}| \leq 2$ для исходной модели СП (1).

4. МЕТОД РЕНОРМГРУППЫ ДЛЯ МАТРИЦЫ ПЛОТНОСТИ

Исследование низкоэнергетических свойств гамильтониана (1) проводилось с использованием метода DMRG при сохранении 64 базисных состояний. В рамках такого подхода были аппроксимированы четыре наименьшие энергии $E_{1,2\pm}$ и соответствующие волновые функции $|\Psi_{1,2\pm}\rangle$ многочастичных состояний: по два для секторов гильбертова пространства с положительной ($P = +1$) и отрицательной ($P = -1$) фермионной четности. Здесь и далее собственные значения P оператора фермионной четности \hat{P} многочастичного состояния считаются положительными (отрицательными), если это состояние описывается суперпозицией парциальных вкладов с четным (нечетным) числом фермионов. Спектр возбуждений системы отсчитывался от основного состояния с энергией $E_0 = \min\{E_{1+}, E_{1-}\}$, которое может характеризоваться как положительной, так и отрицательной фермионной четностью. Энергии первых двух возбуждений определяются как $\varepsilon_j = E_{j-} - E_0$, если $E_0 = E_{1+}$, и $\varepsilon_j = E_{j+} - E_0$, если $E_0 = E_{1-}$ ($j = 1, 2$). Аналогичное обозначение будет использоваться для многочастичной волновой функции основного состояния системы. По определению $\varepsilon_j \geq 0$ и обращение в нуль данных характеристик может свидетельствовать о реализации в системе квантового перехода. Также в рамках DMRG вычислялся многочастичный оператор плотности,

$$\hat{\rho} = \sum_{j=1,2} (p_{j+} |\Psi_{j+}\rangle \langle \Psi_{j+}| + p_{j-} |\Psi_{j-}\rangle \langle \Psi_{j-}|), \tag{11}$$

и редуцированная матрица плотности,

$$\tilde{\rho}_{s,s'} = \sum_e \langle s, e | \hat{\rho} | s', e \rangle, \tag{12}$$

где мы условно обозначили переменные окружения, по которым проводилось суммирование посредством « e ». В качестве «системы» и «окружения» принимались соответственно левая и правая половины цепочки; $p_{1+} + p_{2+} + p_{1-} + p_{2-} = 1$. Знание $\hat{\rho}$ позволяет вычислять равновесные средние значения

физических наблюдаемых системы \hat{A} , в дальнейшем обозначаемые как $\langle \hat{A} \rangle$.

Анализ топологических свойств модели (1) проводился на основе двух критериев. Первый критерий основывался на анализе кратности вырождения спектра квантовой запутанности [55]. А именно, мы анализировали кратность вырождения D_L собственных значений редуцированной матрицы плотности $\tilde{\rho}_{s,s'}$. Если $D_L = 2$ ($D_L = 4$), то в цепочке длины L реализуется одна (две) пары ММ. Если же собственные значения матрицы плотности $\tilde{\rho}_{s,s'}$ невырождены, то в системе реализуется топологически тривиальная фаза без МСС. Это позволило для системы симметричного класса BDI (см. разд. 3) ввести топологический индекс \tilde{N} [56]:

$$\tilde{N} = |N_{BDI}| = [(L_1 - L_0) \ln(2)]^{-1} \sum_{L'=L_0}^{L_1} \ln(D_{L'}). \quad (13)$$

Здесь посредством L_0 (L_1) обозначена нижняя (верхняя) граница интервала длин СП. Усреднение кратности вырождения по длинам цепочки проводится с целью учета возможности сильных флуктуаций \tilde{N} . Такие флуктуации реализуются при подавлении наведенных сверхпроводящих спариваний локальными кулоновскими взаимодействиями и связаны с изменением топологического класса системы (см., например, [56]). С учетом сказанного из формулы (13) следует, что введенный инвариант описывает либо СП с \tilde{N} парами майорановских мод, в случае $\tilde{N} \in \mathbb{Z}$, либо проволоку с подавленными сверхпроводящими спариваниями, если $\tilde{N} \notin \mathbb{Z}$.

Второй критерий построения топологической фазовой диаграммы основывался на анализе спектра возбуждений системы. Так, в тривиальной топологической фазе в случае длинной нанопроволоки $\varepsilon_{1,2} \neq 0$, тогда как в фазе с $\tilde{N} = 1$ ($\tilde{N} = 2$) реализуется ситуация, когда $\varepsilon_1 \rightarrow 0$, $\varepsilon_2 \neq 0$ ($\varepsilon_{1,2} \rightarrow 0$). Практически вычисления D проводились в варианте бесконечного DMRG при $L_0 = 300$, $L_1 = 400$. Другие характеристики вычислялись в варианте конечного DMRG. Длина цепочки L измерялась в единицах постоянной решетки $a = 1$.

5. ТИПЫ КВАЗИЧАСТИЧНЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ

В режиме слабых электронных корреляций, когда описание системы (1) может быть с хорошей точностью проведено в рамках ССП, боголюбовский оператор МСС, $\hat{\alpha}_0$, можно представить в виде су-

перпозиции пары операторов ММ, $\hat{\alpha}_0 = \hat{b}' + i\hat{b}''$, для которых справедливы разложения

$$\hat{b}' = \sum_{f=1,\sigma}^L w_{f\sigma} \hat{\gamma}_{Af\sigma}, \quad \hat{b}'' = \sum_{f=1,\sigma}^L z_{f\sigma} \hat{\gamma}_{Bf\sigma}, \quad (14)$$

где $\hat{\gamma}_{Af\sigma} = \hat{a}_{f\sigma} + \hat{a}_{f\sigma}^\dagger$; $\hat{\gamma}_{Bf\sigma} = i(\hat{a}_{f\sigma} - \hat{a}_{f\sigma}^\dagger)$ — майорановские операторы в узельном представлении. Действительные коэффициенты разложения $w_{f\sigma}$, $z_{f\sigma}$ имеют смысл волновых функций ММ, ассоциированных соответственно с операторами \hat{b}' и \hat{b}'' . В случае МСС волновые функции ММ имеют тенденцию к локализации на противоположных краях проволоки и степень их перекрытия экспоненциально уменьшается при увеличении длины цепочки, приводя к экспоненциальному уменьшению энергии МСС. При этом гибридизация ММ приводит к осциллирующему поведению энергии ММ при изменении параметров системы.

При учете многочастичных эффектов, обусловленных электронными корреляциями, структура квазичастичных возбуждений усложняется. В частности, в разложениях операторов ММ \hat{b}' и \hat{b}'' в энергетическом представлении (14) кроме линейных слагаемых по операторам $\gamma_{i\sigma}$ будут содержаться слагаемые с тремя, пятью и т. д. узельными майорановскими операторами [33, 34, 57]:

$$\begin{aligned} \hat{b}' &= \sum_{i;\sigma} w_{i\sigma} \hat{\gamma}_{i\sigma} + \sum_{ijk;\sigma\eta\lambda} B'_{i\sigma;j\eta;k\lambda} \hat{\gamma}_{i\sigma} \hat{\gamma}_{j\eta} \hat{\gamma}_{k\lambda} + \dots; \\ \hat{b}'' &= \sum_{i;\sigma} z_{i\sigma} \hat{\gamma}_{i\sigma} + \sum_{ijk;\sigma\eta\lambda} B''_{i\sigma;j\eta;k\lambda} \hat{\gamma}_{i\sigma} \hat{\gamma}_{j\eta} \hat{\gamma}_{k\lambda} + \dots, \end{aligned} \quad (15)$$

где $i, j, k = 1, \dots, 2L$; $\sigma, \eta, \lambda = \uparrow, \downarrow$; $\hat{\gamma}_{2f-1,\sigma} = \hat{a}_{f\sigma}^\dagger + \hat{a}_{f\sigma}$, $\hat{\gamma}_{2f,\sigma} = i(\hat{a}_{f\sigma}^\dagger - \hat{a}_{f\sigma})$. В этом случае определение многочастичных операторов ММ сводится к требованиям [33, 34, 57]

$$\hat{b}^2 = 1, \quad [\hat{b}, \hat{H}] = 0, \quad \{\hat{b}, \hat{P}\} = 0, \quad \{\hat{b}', \hat{b}''\} = 0, \quad (16)$$

где $\hat{b} = \hat{b}'$ или $\hat{b} = \hat{b}''$. Тогда фермиевское возбуждение $\hat{\alpha}_0 = \hat{b}' + i\hat{b}''$, реализуемое на подпространстве вырожденных многочастичных состояний с различной фермионной четностью, представляет собой суперпозицию ММ.

С точки зрения многочастичных состояний, возникновение одной (двух) пар ММ в длинных нанопроволоках соответствует двукратному (трехкратному) вырождению основного состояния. При этом вырожденными являются состояния $|\Psi_0\rangle$, $|\Psi_1\rangle$ при реализации одного МСС; $|\Psi_0\rangle$, $|\Psi_{1,2}\rangle$ в случае двух МСС. В случае коротких СП вырождение снимается и изменение параметров системы, таких как μ , h

и L , может приводить к реализации квантовых переходов либо в полном многочастичном гильбертовом пространстве, либо в подпространствах с фиксированной фермионной четностью.

Кроме МСС в двух нетривиальных фазах в модели СП (1) также существуют краевые состояния, которые возникают в континуальной области параметров с $\tilde{N} = 0$. Энергия таких возбуждений отлична от нуля. Состояния такого типа были найдены нами в СП в режиме слабых электронных корреляций. Они аналогичны краевым состояниям, предсказанным в работе [58].

Дополнительно, в режиме СЭК при $\tilde{N} = 0$ могут возникать состояния, для которых характерна существенная гибридизация волновых функций ММ и осциллирующее в зависимости от параметров модели поведение энергий возбуждения. При этом ε_1 может периодически обращаться в нуль, а амплитуда осцилляций существенно превышать таковые в случае с истинными МСС в нетривиальных фазах. Отмеченные особенности связаны с локальным подавлением сверхпроводимости в СП. Таким образом, для различных параметров модели (1) могут реализовываться следующие квазичастичные возбуждения (см. рис. 1):

- i) тривиальные возбуждения в фазе с $\tilde{N} = 0$. Характеризуются существенной гибридизацией ММ и делокализованным характером возбуждения;
- ii) краевые возбуждения в фазе с $\tilde{N} = 0$. Характеризуются существенной гибридизацией ММ, но краевым характером возбуждения;
- iii) МСС при $\tilde{N} = 1$. Первое возбуждение характеризуется слабой гибридизацией ММ, уменьшающейся экспоненциально с увеличением L ;
- iv) МСС при $\tilde{N} = 2$. Первые два возбуждения характеризуются слабой гибридизацией ММ, уменьшающейся экспоненциально с увеличением L ;
- v) псевдомайорановские возбуждения в фазе с $\tilde{N} = 0$. Для достаточно коротких цепочек их структура аналогична МСС типа iii) или iv), однако при увеличении длины цепочки возбуждения становятся делокализованными.
- vi) быстро осциллирующие делокализованные возбуждения в фазе с $\tilde{N} = 0$. В отличие от возбуждений типа i) их пространственная

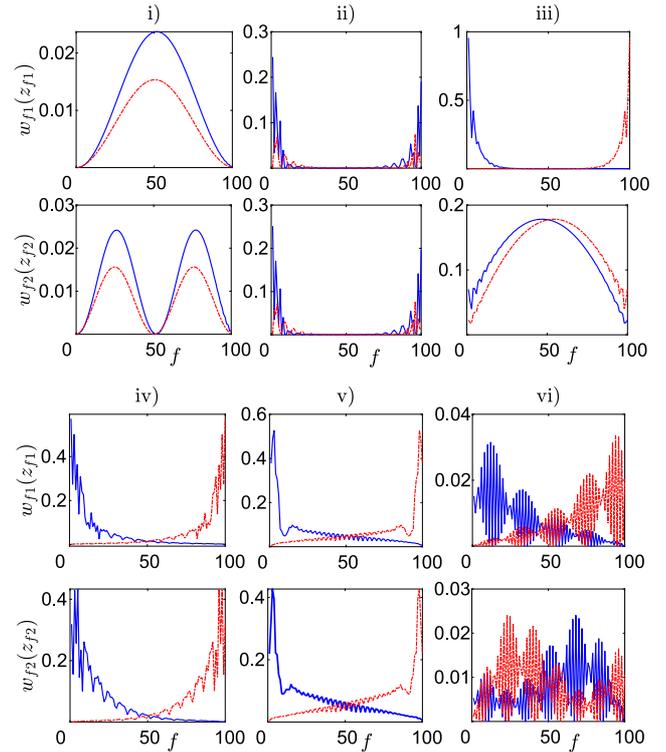


Рис. 1. Пространственные зависимости волновых функций майорановских мод первых двух квазичастичных возбуждений для состояний типа i)–vi). Сплошная кривая отвечает коэффициентам w_{fj} ; пунктир — z_{fj} . Параметры в единицах $t > 0$ принимались следующие: $\alpha = 1.5$, $\Delta = -0.5$, $\Delta_1 = 0.1$; $U = 0.5$, $\mu = 0.5$, $h = 1.3$ и $h = 0.65$ для построений типа i) и ii) соответственно; $\Delta_1 = 0.2$, $U = 3$, $h = 0.2$, $\mu = -0.1$ и 1.1 для построений типа iii) и iv) соответственно; $\Delta_1 = 0.2$, $U = 8$, $h = 0.2$, $\mu = -1.64$ для состояний типа v); $\Delta_1 = 0.2$, $U = 8$, $h = 0.4$, $\mu = -0.8$ для состояний типа vi)

структура характеризуется быстрыми осцилляциями волновых функций ММ с медленной модуляцией.

На рис. 1 возбуждения типа i)–vi) представлены путем построения пространственной зависимости действительных коэффициентов

$$w_{fj} = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} |\langle \Psi_j | (\hat{a}_{f\sigma} + \hat{a}_{f\sigma}^\dagger) | \Psi_0 \rangle|,$$

$$z_{fj} = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} |\langle \Psi_j | (\hat{a}_{f\sigma} - \hat{a}_{f\sigma}^\dagger) | \Psi_0 \rangle|, \quad j = 1, 2,$$

связанных с волновыми функциями квазичастиц $\hat{\alpha}_j = \hat{b}'_j + i\hat{b}''_j$, описывающих переход из основного многочастичного состояния $|\Psi_0\rangle$ в одно из возбужденных состояний $|\Psi_j\rangle = \hat{\alpha}_j^\dagger |\Psi_0\rangle$. При этом коэффициенты w_{fj} и z_{fj} относятся к майорановским

операторам соответственно \hat{b}'_j и \hat{b}''_j . Видно, что для возбуждений типа i) и ii) волновые функции ММ существенно перекрываются между собой, формируя состояния с конечной энергий $\varepsilon_j > 0$. При этом первые имеют объемный характер, а вторые — краевой. Для майорановских возбуждений типа iii) и iv) перекрытие волновых функций ММ экспоненциально убывает с увеличением длины цепочки, что приводит к возникновению бесщелевых возбуждений. Так, для случая iii) $\varepsilon_1 \sim \exp(-L)$, $\varepsilon_2 > 0$, тогда как для случая iv) $\varepsilon_{1,2} \sim \exp(-L)$. При этом слабая гибридизация волновых функций ММ приводит к тому, что при изменении параметров модели (1) реализуется серия квантовых переходов между состояниями $|\Psi_0\rangle$ и $|\Psi_1\rangle$ с изменением фермионной четности основного состояния для возбуждений типа iii); серия переходов между состояниями $|\Psi_1\rangle$ и $|\Psi_2\rangle$ без изменения P для возбуждений типа iv). Также на рис. 1 приведены тривиальные и делокализованные возбуждения типа vi), возникающие в режиме СЭК, пространственная структурах которых (в отличие от возбуждений типа i)) характеризуется быстрыми осцилляциями волновых функций ММ, модулированными в пространстве (так называемая волна плотности). Такое поведение приводит к пилообразной зависимости энергий возбуждений $\varepsilon_{1,2}$ от параметров системы и сопутствующей серии квантовых переходов с изменением P . Существование таких переходов может проявлять себя в калорических характеристиках системы.

Существенно, что в режиме СЭК реализуются также псевдомайорановские возбуждения типа v), которые имеют сходства с МСС типа iii) или iv). Так, на рис. 1 приведены возбуждения типа v), имеющие сходства с состояниями типа iv): для относительно коротких цепочек волновые функции квазичастиц $\hat{\alpha}_j$ локализованы вблизи краев цепочки, а гибридизация волновых функций ММ приводит к каскаду квантовых переходов между состояниями $|\Psi_1\rangle$ и $|\Psi_2\rangle$ при изменении параметров системы. Однако в отличие от возбуждений типа iv) у возбуждений типа v) гибридизация волновых функций ММ сохраняется с ростом L . В пределе длинных цепочек $L \rightarrow \infty$ такие возбуждения становятся делокализованными вследствие сохраняющейся гибридизации волновых функций ММ с конечной нормировкой. Возбуждения типа v) отвечают тривиальному значению топологического инварианта $\tilde{N} = 0$, но при определенных условиях они могут мимикрировать под топологически нетривиальные возбуждения типа iii) или iv).

Из рассмотрения квазичастичных возбуждений приведенных типов следует, что для их однозначной идентификации в физических экспериментах необходимо и достаточно исследовать две их особенности: характер локализации возбуждений (краевой или объемный) и тенденцию к реализации квантовых переходов при изменении параметров системы. В разд. 6 мы рассмотрим две наблюдаемые характеристики, позволяющие идентифицировать отмеченные особенности при учете электрон-электронных взаимодействий.

6. СПИНОВАЯ ПОЛЯРИЗАЦИЯ И КАЛОРИЧЕСКИЕ ФУНКЦИИ

Естественными кандидатами для детектирования характера пространственного распределения возбуждений являются пространственные профили зарядовой плотности и спиновой поляризации нанопроволоки. Однако корректное введение таких наблюдаемых требует учета особенностей топологически нетривиальных возбуждений, связанных с перекрываемостью волновых функций ММ, формирующих одно МСС. В приближении ССП эта особенность может быть выражена в виде условия $w_{f\sigma} z_{f\sigma} = 0$ для любого узла f . Такая ситуация определяет электрическую и спиновую нейтральность МСС, поскольку зарядовая и спиновая плотности боголюбовских квазичастиц определяются выражениями

$$\begin{aligned} \delta n_{f,j} &= \sum_{\sigma} w_{f\sigma;j} z_{f\sigma;j}, \\ \delta s_{f,j}^z &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \eta_{\sigma} w_{f\sigma;j} z_{f\bar{\sigma};j}, \\ \delta s_{f,j}^x &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma} w_{f\sigma;j} z_{f\bar{\sigma};j}. \end{aligned}$$

В работах [43–45, 59, 60] было показано, что при $U = 0$, рассматривая только электронную или только дырочную компоненты изменений $\delta n_{f\sigma,j}$ и $\delta s_{f\sigma,j}^{x,z}$, можно различать квазичастичные возбуждения в тривиальной и нетривиальной ТФ. В частности, пространственное распределение электронной компоненты $s_{f\sigma,j}^{x,z}$ для МСС имеет краевой характер. Для выделения электронной компоненты зарядовой (спиновой) плотности в режиме слабых электронных корреляций необходимо к характеристикам $\delta n_{f,j}$ ($\delta s_{f,j}^z$) добавить одночастичные вклады, связанные с дырочным фоном $\sum_{\sigma} |v_{f\sigma;j}|^2$ ($\sum_{\sigma} \eta_{\sigma} |v_{f\sigma;j}|^2$).

В режиме СЭК актуальной является переформулировка изменения спиновых и зарядовых профилей системы в терминах многочастичных состояний:

$$\begin{aligned} \delta s_{f,j}^z &= \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma} \eta_{\sigma} [\langle \Psi_j | \hat{a}_{f\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{f\sigma} | \Psi_j \rangle - \langle \Psi_0 | \hat{a}_{f\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{f\sigma} | \Psi_0 \rangle], \quad (17) \\ \delta n_{f,j} &= \sum_{\sigma} [\langle \Psi_j | \hat{a}_{f\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{f\sigma} | \Psi_j \rangle - \langle \Psi_0 | \hat{a}_{f\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{f\sigma} | \Psi_0 \rangle]. \end{aligned}$$

Аналогично сказанному выше $\delta n_{f,j}$, $\delta s_{f,j}^z \sim \exp(-L)$, если $\tilde{N} \neq 0$. Для нахождения ненулевых электронных компонент мы предлагаем по аналогии учесть вклады от одночастичного дырочного фона в виде

$$\begin{aligned} n_{f,j} &= \delta n_{f,j} + \sum_{\sigma} \langle \Psi_j | \hat{a}_{f\sigma} | \Psi_0 \rangle \langle \Psi_0 | \hat{a}_{f\sigma}^{\dagger} | \Psi_j \rangle, \\ s_{f,j}^z &= \delta s_{f,j}^z + \sum_{\sigma} \langle \Psi_j | \hat{a}_{f\sigma} | \Psi_0 \rangle \langle \Psi_0 | \hat{a}_{f\sigma}^{\dagger} | \Psi_j \rangle. \end{aligned} \quad (18)$$

В приближении ССП величины $n_{f,j}$ и $s_{f,j}^z$ сводятся к определениям электронной компоненты изменения заряда и спиновой поляризации j -го элементарного возбуждения

$$n_{f,j}^0 = \sum_{\sigma} |u_{f\sigma;j}|^2, \quad s_{f,j}^{0z} = \sum_{\sigma} \eta_{\sigma} |u_{f\sigma;j}|^2,$$

введенным в [43–45, 59, 60]. Здесь и ранее коэффициенты Боголюбова

$$u_{f\sigma;j} = \langle \Psi_j | \hat{a}_{f\sigma}^{\dagger} | \Psi_0 \rangle \quad (v_{f\sigma;j} = \langle \Psi_j | \hat{a}_{f\sigma} | \Psi_0 \rangle)$$

описывают электронную (дырочную) компоненту волновой функции соответствующего возбуждения. В режиме СЭК отмеченное строгое равенство нарушается, однако с хорошей точностью реализуется приближенные равенства $n_{f,j} \approx n_{f,j}^0$, $s_{f,j}^z \approx s_{f,j}^{0z}$ (в частности, см. ниже рис. 6).

Анализ пространственного поведения $n_{f,j}$ и $s_{f,j}^z$ позволяет идентифицировать состояния разных типов, описанных в разд. 5. Однако на данном этапе нет оснований утверждать, что взаимодействие квантовой системы с измерительным прибором при измерении $s_{f,j}^z$ ($n_{f,j}$) позволит однозначно определить каждую из отмеченных фаз по отдельности. В частности, видится проблематичным экспериментально отделить фазы типа ii), iv) и v). В работах [43–45, 59, 60] предлагалось решать данную проблему посредством изучения спин-поляризованного транспорта, что позволяло одновременно с поведением спиновой поляризации $s_{f,j}^z$ наблюдать особенности спектра возбуждений системы. Однако такое рассмотрение проводилось в режиме слабых

электронных корреляций, когда возбуждения СП являются с высокой точностью одночастичными. В режиме сильных электронных корреляций подобный анализ требует развития теории электронного транспорта (например, спин-поляризованной туннельной микроскопии) при корректном учете многочастичных эффектов. Такая задача выходит за пределы настоящего исследования.

В настоящей работе для экспериментальной идентификации особенностей спектра возбуждений мы предлагаем использовать величины магнито- и электрокалорических эффектов нанопроволоки (соответственно МСЕ и ЕСЕ). Важной особенностью таких характеристик является то, что их поведение определяется только наличием или отсутствием в системе квантовых переходов и не зависит от структуры многочастичных состояний [61, 62]. Соответственно, поведение МСЕ и ЕСЕ позволяет определить особенности спектра возбуждений системы при произвольных амплитудах межэлектронных взаимодействий. Ранее поведение МСЕ и ЕСЕ в СП рассматривалось в работах [39, 40, 46]. Для наглядности приведем здесь только выражения для электрокалорического эффекта, справедливое в приближении ССП:

$$\begin{aligned} \text{ECE} &= -\frac{1}{T} \left(\frac{\partial T}{\partial \mu} \right)_{S,h} = \left(\frac{\partial \langle \hat{N} \rangle / \partial T}{C(T)} \right)_{\mu,h}, \\ \frac{\partial \hat{N}}{\partial T} &= \frac{1}{2T^2} \sum_{m=1}^{2L} A_m \varepsilon_m f(\varepsilon_m) (1 - f(\varepsilon_m)), \quad (19) \\ C(T) &= \frac{1}{T^2} \sum_{m=1}^{2L} \varepsilon_m^2 f(\varepsilon_m) (1 - f(\varepsilon_m)), \\ A_m &= \sum_{f=1,\sigma}^L w_{f\sigma,m} z_{f\sigma,m}, \quad \hat{N} = \sum_{f=1,\sigma}^L \hat{a}_{f\sigma}^{\dagger} \hat{a}_{f\sigma} \end{aligned}$$

где \hat{N} — оператор полного числа электронов в проволоке, а $f(\varepsilon_m/T)$ — функция Ферми–Дирака. Из выражений (19) следует, что если в спектре возбуждений открытой системы имеется щель и рассматриваются низкие температуры, $\varepsilon_m \lesssim T \ll \varepsilon_{n>m}$, то ЕСЕ демонстрирует ряд особенностей. Так, при $m = 1$ электрокалорическая функция испытывает расходимость в квантовых критических точках и имеет разные знаки слева и справа от них. Поскольку в коротких нанопроволоках в топологически нетривиальной области параметров с $\tilde{N} = 1$, а также в состоянии с $\Delta = \Delta_1 = 0$ осцилляции одного из элементарных возбуждений относительно нуля энергии соответствуют каскаду квантовых переходов, величина

электрокалорического эффекта демонстрирует серию аномалий при низких температурах. В области с $\tilde{N} = 2$ (т.е. $m = 2$) величины калорических эффектов при низких температурах демонстрируют осциллирующее поведение со сменой знака, но без аномалий, поскольку основное состояние не меняется, но реализуются квантовые переходы в дуальном к основному подпространстве с фиксированной фермионной четностью. В тривиальной ТФ с щелевым спектром и при температурах много меньших характерной величины энергетической щели величина ЕСЕ $\rightarrow 0$.

Аналогичные выводы справедливы для величин магнитокалорического эффекта, а также для поведения МСЕ и ЕСЕ в режиме сильных электронных корреляций. В последнем случае выражение для ЕСЕ представляется в форме (19), для которой

$$\begin{aligned} \frac{\partial \langle \hat{N} \rangle}{\partial T} &= \frac{1}{T^2} (\langle \hat{H}_W \hat{N} \rangle - \langle \hat{H}_W \rangle \langle \hat{N} \rangle), \\ C(T) &= \frac{1}{T^2} (\langle \hat{H}_W^2 \rangle - \langle \hat{H}_W \rangle^2), \\ \hat{N} &= \sum_{f\sigma} \hat{a}_{f\sigma}^\dagger \hat{a}_{f\sigma}. \end{aligned} \quad (20)$$

Здесь усреднение с оператором плотности (11) проводилось в предположении, что $p_{j\pm} = e^{-E_{j\pm}/T}/Z$, где $Z = \sum_{j=1,2; \nu=\pm} e^{-E_{j\nu}/T}$. Поскольку для рассматриваемой модели имеется однозначное соответствие между поведением низкоэнергетических ветвей спектра возбуждений и низкотемпературным поведением ЕСЕ (МСЕ), в следующем разделе будем приводить более репрезентативные зависимости энергий возбуждений $\varepsilon_{1,2}$ от параметров модели. При этом зависимости $\varepsilon_{1,2}(\mu)$ будем рассматривать совместно с зависимостями $s_{f,j}^z(\mu)$ и подробно анализировать случай СЭК, слабо изученный к настоящему времени.

7. ОСОБЕННОСТИ НАБЛЮДАЕМЫХ ХАРАКТЕРИСТИК НАНОПРОВОЛОКИ В РЕЖИМЕ СИЛЬНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ КОРРЕЛЯЦИЙ

Рассмотрим, как общие утверждения предыдущих разделов проявляют себя для нанопроволоки (1) в режиме СЭК с $U = 8$ (все величины измеряются в единицах $t > 0$). Зависимости энергий элементарных возбуждений $\varepsilon_{1,2}$ и топологического индекса \tilde{N} от химического потенциала приведены на рис. 2. Видно, что в системе могут реализовываться фазы с отсутствием, одним и двумя

МСС. При этом критическими точками, при которых реализуются топологические переходы, являются значения химического потенциала: $\mu_1 \approx -1.65$, $\mu_2 \approx -1$, $\mu_3 \approx -0.57$, $\mu_4 \approx 1.14$. Отметим, что зависимости энергии возбуждения $\varepsilon_{1,2}$ от химического потенциала в областях $\mu_2 < \mu < \mu_3$ и $\mu_3 < \mu < \mu_4$ выглядят аналогичными, несмотря на различные значения топологических индексов в этих областях. Такая схожесть является следствием конечности рассматриваемой цепочки. Так, при увеличении L в области с $\tilde{N} = 1$ энергия возбуждений ε_1 экспоненциально стремится к нулю, тогда как в области с $\tilde{N} = 0$ такого не происходит.

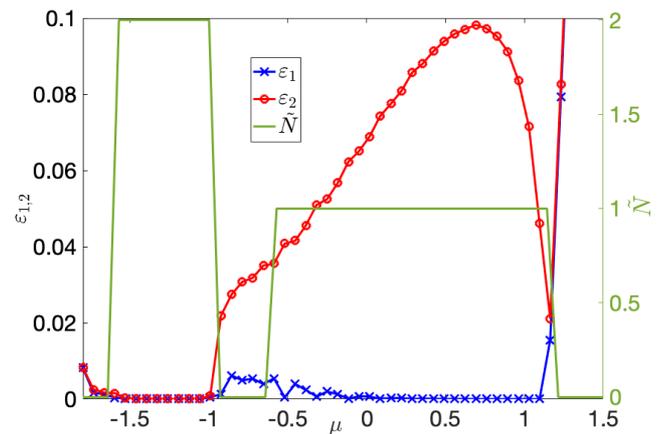


Рис. 2. Зависимость двух нижних энергий возбуждения $\varepsilon_{1,2}$ (левая ось ординат) и топологического инварианта \tilde{N} (правая ось ординат) от химического потенциала μ . Параметры: $\alpha = 1.5$, $\Delta = -0.5$, $\Delta_1 = 0.2$; $h = 0.4$, $U = 8$

Не зависит, однако, от длины цепочки характер поведения фермионной четности основного состояния, зависимость которого от химического потенциала приведена на рис. 3. Видно, что в областях с $\tilde{N} = 2$ и $\tilde{N} = 1$ зависимость $P(\mu)$ является соответственно постоянной и осциллирующей. С микроскопической точки зрения постоянная зависимость $P(\mu)$ в области $\tilde{N} = 2$ означает, что фермионная четность основного состояния $|\Psi_0\rangle$ является положительной, тогда как состояния из сопряженного сектора гильбертова пространства, $|\Psi_1\rangle$ и $|\Psi_2\rangle$, сменяют друг друга в качестве первого возбужденного при изменении параметров системы. Осциллирующее поведение $P(\mu)$ означает то, что в качестве основного сменяют друг друга состояния $|\Psi_0\rangle$ и $|\Psi_1\rangle$, относящиеся к сопряженным секторам гильбертова пространства.

Таким образом, в области с $\tilde{N} = 1$ в системе наблюдается серия квантовых переходов с изменением фермионной четности основного состояния. Согласно

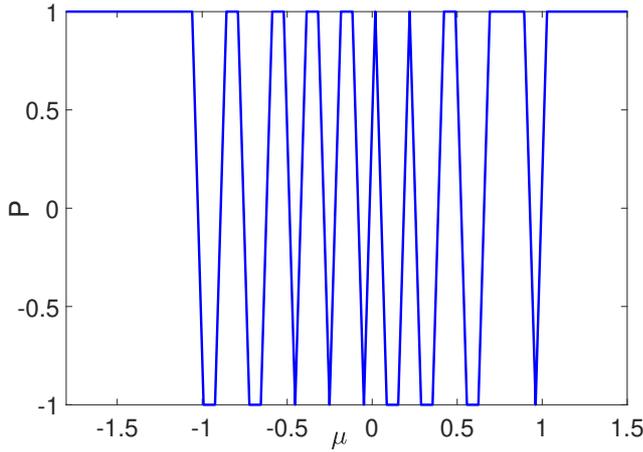


Рис. 3. Зависимость фермионной четности основного состояния от химического потенциала, $P(\mu)$, для параметров рис. 2

но общей теории [61, 62], в этой области при изменении параметров системы должна наблюдаться серия калорических аномалий, подобная той, что обсуждалась в разд. 6. Вычисления величины электрокалорического эффекта по формулам (19) и (20) подтверждают данные заключения. Поведение зависимостей $E_{CE}(\mu)$ аналогично поведению $M_{CE}(h)$ в работе [46]: в области с $\tilde{N} = 1$ величина электрокалорического эффекта демонстрирует серию аномалий со сменой знака в точках смены P , тогда как в области с $\tilde{N} = 2$ зависимость $E_{CE}(\mu)$ осциллирует от носителя нуля с конечной амплитудой.

Важно, что в режиме СЭК на фазовой диаграмме системы индуцируется фаза с $\tilde{N} = 0$ (область $\mu_2 < \mu < \mu_3$ на рис. 2) и возбуждениями типа ν_i из разд. 5, в которой система демонстрирует серию квантовых переходов с осцилляциями индекса F . При изменении параметров внутри данной области величина $E_{CE}(\mu)$ демонстрирует серию аномалий которые аналогичны аномалиям в параметрической области с $\tilde{N} = 1$. Таким образом, в сильно коррелированной СП измерение электрокалорических функций, в общем случае, не позволяет различать тривиальные и нетривиальные фазы. Качественно отмеченный эффект объясняется тем, что в случае сильных электронных корреляций $U \gg 1$ в системе реализуются параметрические области с подавленной за счет электронных взаимодействий сверхпроводимостью. Для последней характерна реализация тривиальной ТФ с осциллирующим поведением минимальной энергии возбуждения и фермионной четности основного состояния.

Для преодоления отмеченной неопределенности в идентификации ТФ на основе наблюдаемых характеристик мы предлагаем использовать особенности поведения электронных компонент зарядовой и спиновой поляризации многочастичных возбуждений. DMRG-расчеты в режиме СЭК продемонстрировали, что распределения характеристик $n_{f,j}$ и $s_{f,j}^z$ по узлам цепочки имеют делокализованный характер, если $\tilde{N} = 0$, и краевой характер для $j = 1$ ($j = 1, 2$), если $\tilde{N} = 1$ ($\tilde{N} = 2$). Так, примеры пространственных зависимостей $s_{f,j}^z$ для параметров, отвечающих различным фазам системы, приведены на рис. 4. Дополнительно, из сравнения второго и четвертого столбцов на рис. 4 следует, что распределения для тривиальных фаз имеют разных характер. При $\mu_2 < \mu < \mu_3$ система далека от половинного заполнения. В результате за счет большой интенсивности хаббардовского отталкивания для обоих возбуждений наблюдаются волны спиновой плотности — модулированные в пространстве сильные осцилляции $s_{1,2}^z$. При $\mu > \mu_4$ средняя одноузельная концентрация равна единице, что, по сути, нивелирует эффект зарядовых корреляций.

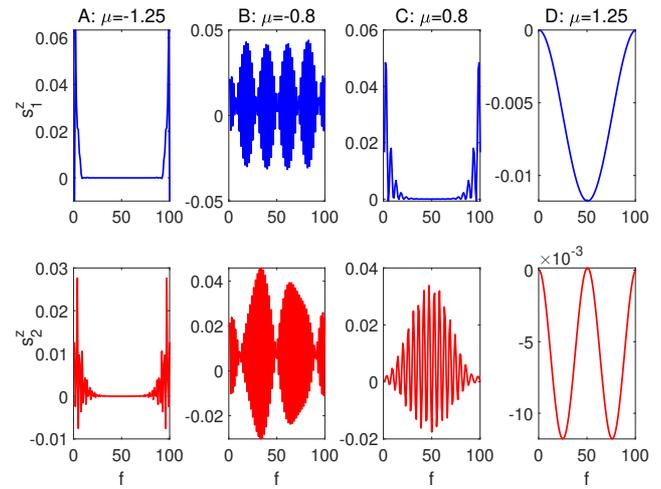


Рис. 4. Пространственные распределения спиновой поляризации первого (верхний ряд) и второго (нижний ряд) возбуждений в различных топологических фазах для параметров рис. 2

Для упрощения анализа эволюции такого рода распределений в параметрическом пространстве удобно использовать интегральную величину IPR (inverse participation ratio), которая активно применяется для характеристики одночастичных возбуждений в низкоразмерных системах с открытыми граничными условиями [63–66]. Например, обобщение

IPR на случай спиновой поляризации имеет вид

$$sIPR_j = \frac{\sum_f |s_{f,j}^z|^2}{\left(\sum_f |s_{f,j}^z|\right)^2}, \quad j = 1, 2. \quad (21)$$

Исходя из формулы (21), $sIPR_j$ имеет порядок $1/L$ для делокализованного распределения $s_{f,j}^z$, и много больше чем $1/L$ для распределения, имеющего краевой характер ($sIPR_j = 1$ в предельном случае распределений, локализованных строго на крайних узлах).

На рис. 5 приведена зависимость величины $sIPR$, определяемой выражением (21), от химического потенциала (см. левую ось ординат). Видно, что в области с $\tilde{N} = 0$, реализуемой при значениях химического потенциала $\mu < \mu_1$, $\mu_2 < \mu < \mu_3$ и $\mu_4 < \mu$, значения $sIPR_j(\mu) \ll 1$. В области с $\tilde{N} = 1$ и $\tilde{N} = 2$ заметно отличными от нуля являются соответственно зависимости $sIPR_1(\mu)$ и $sIPR_{1,2}(\mu)$. Отметим, что на рис. 5 значения величин $sIPR_j$ различаются незначительно в левой и правой малой окрестности точек топологических фазовых переходов (в точках $\mu_{1,\dots,4}^\pm = \mu_{1,\dots,4} \pm \delta$, где $\delta \ll 1$). Такая плавность изменения значений $sIPR_j$ связана с тем, что последняя характеристика рассчитывалась для конечной цепочки с $L = 100$. С ростом L резкость изменения IPR-характеристик при прохождении этих точек увеличивается. Таким образом, совместный анализ особенностей калорических функций и спиновой поляризации многочастичных возбуждений позволяет однозначно идентифицировать различные топологические фазовые состояния системы и соответствующие им виды низкоэнергетических возбуждений, описанные в разд. 5.

В заключении сравним $sIPR_{1,2}$, полученные на основе формулы (18), с аналогичными величинами $sIPR_{1,2}^0$, когда спиновая поляризация определяется, исходя из обобщенных коэффициентов Боголюбова [39, 43]. Зависимости $sIPR$ от интенсивности одноузельного кулоновского взаимодействия приведены на рис. 6. Как следует из графика, при заданных значениях химического потенциала и зеемановской энергии имеется одно МСС при $U < 4$. В этом диапазоне U наблюдается количественное согласие между двумя типами $sIPR$. В свою очередь, при $U > 4$, когда упомянутая топологическая фаза подавляется, согласие между $sIPR_{1,2}$ и $sIPR_{1,2}^0$ становится качественным.

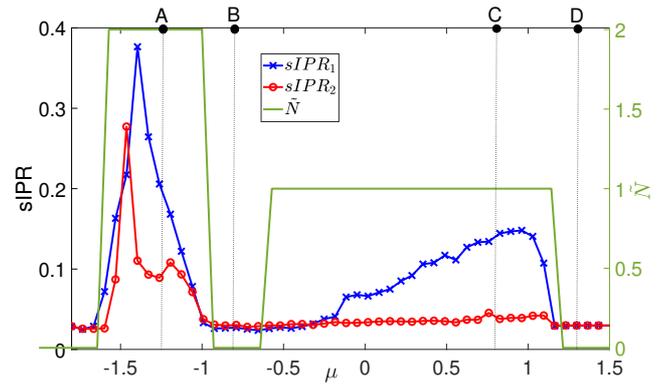


Рис. 5. Зависимость $sIPR$ (левая ось y) и топологического инварианта \tilde{N} (правая ось y) от химического потенциала для параметров рис. 2. Буквами A, \dots, D обозначены величины μ , для которых на рис. 4 построены пространственные распределения спиновой поляризации первых двух возбуждений

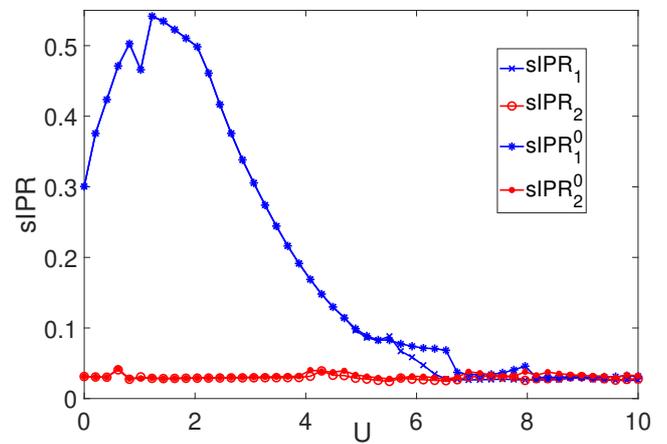


Рис. 6. Функция $sIPR(U)$ для первых двух возбуждений, рассматриваемых как строго одночастичные процессы (см. кривые с маркерами-звездочками и маркерами-точками) и как переходы с учетом многочастичных вкладов (см. кривые с маркерами-крестиками и маркерами-кружками), для параметров рис. 2 и $\mu = -0.8$

8. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе рассмотрен вопрос об идентификации топологических фаз сильно коррелированной сверхпроводящей нанопроволоки со спин-орбитальным взаимодействием Рашба и зеемановским расщеплением одноузельных энергий частиц. Ранее было показано [39, 46], что для такой системы в качестве наблюдаемой характеристики могут выступать величины магнито- и электрокалорического эффектов. В настоящей работе демонстрируется, что в режиме сильных электронных корреляций для однозначного определения различных состояний

системы измерений одних калорических функций недостаточно. В частности, в режиме СЭК индуцируется топологически тривиальная фаза, в которой поведение калорических функций аналогично поведению в фазе топологической сверхпроводимости с одним МСС. В качестве дополнительной наблюдаемой характеристики в работе предложено анализировать степень локализации электронной компоненты спиновой поляризации многочастичных возбуждений СП. В отсутствие электрон-электронных взаимодействий, а также в режиме слабых зарядовых корреляций данная характеристика сводится к определениям, предложенным ранее в работах [43–45, 59, 60]. Расчеты с помощью метода ренормгруппы для матрицы плотности показали, что даже при учете взаимодействий между фермионами электронная компонента спиновой поляризации низкоэнергетических возбуждений имеет тенденцию к локализации вблизи краев цепочки в топологической фазе. Однако обратное, вообще говоря, не верно. В частности, в нанопроволоке могут реализовываться краевые возбуждения нетопологического характера, которые нельзя однозначно идентифицировать с помощью анализа спиновой поляризации, но которые могут быть идентифицированы калорическими измерениями. В этой связи в работе делается вывод, что для однозначной идентификации фазовых состояний системы с различными типами краевых возбуждений (топологического и нетопологического характера) в нанопроволоке, в том числе сильно коррелированной, недостаточно изучать отдельно ее калорические характеристики и особенности спиновой поляризации, а необходимо анализировать их совместно.

Благодарности. Авторы благодарят А. Д. Федосеева за дискуссии.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты № 19-02-00348, № 20-02-00015), правительства Красноярского края и Краевого фонда науки (проекты № 20-42-243001, 20-42-243005), совета по грантам Президента РФ (проекты № МК-1641.2020.2, МК-4687.2022.1). Один из авторов, Ш. М. С., благодарит Фонд развития теоретической физики и математики «БАЗИС».

ЛИТЕРАТУРА

1. N. Read and D. Green, Phys. Rev. B **61**, 10267 (2000).
2. А. Ю. Китаев, УФН **44**, 131 (2001).

3. V. Kaladzhyan and C. Bena, Phys. Rev. B **100**, 081106 (2019).
4. Q. Wang, C.-C. Liu, Y.-M. Lu, et al., Phys. Rev. Lett. **121**, 186801 (2018).
5. X. Zhu, Phys. Rev. B. **91**, 205134 (2018).
6. C. Nayak, S. H. Simon, A. Stern et al., Rev. Mod. Phys. **80**(3), 1083 (2008).
7. J. Alicea, Rep. Prog. Phys. **75**, 076501 (2012).
8. S. R. Elliot and M. Franz, Rev. Mod. Phys. **87**, 137 (2015).
9. M. Sato and Y. Ando, Rep. Prog. Phys. **80**, 076501 (2017).
10. В. В. Вальков, М. С. Шустин, С. В. Аксенов и др., УФН **192**, 3 (2022).
11. A. P. Mackenzie and Y. Maeno, Rev. Mod. Phys. **75**, 657 (2003).
12. S. Das Sarma, C. Nayak, and S. Tewari, Phys. Rev. B **73**, 220502(R) (2006).
13. A. Pustogow, Y. Luo, A. Chronister et al., Nature **574**, 72 (2019).
14. S.-I. Suzuki, M. Sato, and Y. Tanaka, Phys. Rev. B **101**, 054505 (2020).
15. J. D. Sau and S. Tewari, Phys. Rev. B **86**, 104509 (2012).
16. В. П. Минеев, УФН **187**, 129 (2017).
17. R. M. Lutchyn, J. D. Sau, and S. Das Sarma, Phys. Rev. Lett. **105**, 077001 (2010).
18. Y. Oreg, G. Refael, and F. von Oppen, Phys. Rev. Lett. **105**, 177002 (2010).
19. V. Mourik, K. Zuo, S. M. Frolov et al., Science **336**, 1003 (2012).
20. M. T. Deng, C. L. Yu, G. Y. Huang et al., Nano Lett. **12**, 6414 (2012).
21. F. Nichele, A. C. C. Drachmann, A. M. Whiticar et al., Phys. Rev. Lett. **119**, 136803 (2017).
22. H. Zhang, C.-X. Liu, S. Gazibegovic et al., Nature (London) **556**, 74 (2018).
23. P. Yu, J. Chen, M. Gomanko et al., Nat. Phys. **17**, 482 (2021).
24. S. Vaitiekėnas, Y. Liu, P. Krogstrup et al., Nature Physics, 17 (2020).
25. C. Moore, T. D. Stanescu, and S. Tewari, Phys. Rev. B **97**, 165302 (2018).
26. C. Reeg, O. Dmytruk, D. Chevallier et al., Phys. Rev. B **98**, 245407 (2018).

27. H. Zhang, C.-X. Liu, S. Gazibegovic et al., *Nature* **581**, E4 (2020).
28. Y. Sato, S. Matsuo, C.-H. Hsu et al., *Phys. Rev. B* **99**, 155304 (2019).
29. R. Thomale, S. Rachel, and P. Schmitteckert, *Phys. Rev. B* **88**, 161103(R) (2013).
30. Y.-H. Chan, C.-K. Chiu, and K. Sun *Phys. Rev. B* **92**, 104514 (2015).
31. N. M. Gergs, L. Fritz, and D. Schurich, *Phys. Rev. B* **93**, 075129 (2016).
32. J.-J. Miao, H.-K. Jin, Y. Zhou, *Sci. Rep.* **8**:488, 1 (2018).
33. G. Kells, *Phys. Rev. B* **92**, 081401(R) (2015).
34. G. Kells, *Phys. Rev. B* **92**, 155434 (2015).
35. S. R. White, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2863 (1992).
36. S. R. White, *Phys. Rev. B* **48**, 10345 (1993).
37. U. Schollwock, *Rev. Mod. Phys.* **77**, 259 (2005).
38. U. Schollwock, *Ann. Phys.* **326**, 96 (2011).
39. В. В. Вальков, В. А. Мицкан, М. С. Шустин, Письма в ЖЭТФ **12**, 762 (2017).
40. V. V. Val'kov, M. Yu. Kagan, and S. V. Aksenov, *J. Phys.: Cond. Matt* **31**, 225301 (2019).
41. В. В. Вальков, С. В. Аксенов, ФНТ **43**, 546 (2017).
42. V. V. Val'kov and S. V. Aksenov, *J. Magn. Magn. Mat* **440**, 112 (2017).
43. D. Sticlet, C. Bena, and P. Simon, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 096802 (2012).
44. P. Szumniak, D. Chevallier, D. Loss et al., *Phys. Rev. B* **96**, 041401(R) (2017).
45. M. Serina, D. Loss, and J. Klinovaja, *Phys. Rev. B* **98**, 035419 (2018).
46. S. V. Aksenov, A. O. Zlotnikov, and M. S. Shustin, *Phys. Rev. B* **101**, 125431 (2020).
47. E. M. Stoudenmire, J. Alicea, O. A. Starykh et al., *Phys. Rev. B* **84**, 014503 (2011).
48. M. R. Zirnbauer, *J. Math. Phys.* **37**, 4986 (1996).
49. A. Altland and M. R. Zirnbauer, *Phys. Rev. B* **55**, 1142 (1997).
50. P. Heinzner, A. Huckleberry, and M. R. Zirnbauer, *Commun. Math. Phys.* **257**, 725 (2005).
51. A. P. Schnyder, S. Ryu, A. Furusaki et al., *Phys. Rev. B* **78**, 195125 (2008).
52. A. P. Schnyder, S. Ryu, A. Furusaki, et al., *AIP Conf. Proc.* **1134**, 10 (2009).
53. A. Yu. Kitaev, *AIP Conf. Proc.* **1134**, 10 (2009).
54. W. DeGottardi, M. Thakurathi, S. Vishveshwara et al., *Phys. Rev. B* **88**, 165111 (2013).
55. A. M. Turner, F. Pollmann, and E. Berg, *Phys. Rev. B* **83**, 075102 (2011).
56. М. С. Шустин, С. В. Аксенов, ФТТ **63**, 1758 (2021).
57. G. Goldstein and C. Chamon, *Phys. Rev. B* **86**, 115122 (2012).
58. А. Д. Федосеев, ЖЭТФ **155**, 138 (2019).
59. M. Leijnse and K. Flensberg, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 210502 (2011).
60. Y. Nagai, H. Nakamura, and M. Machida, *J. Phys. Soc. Jpn.* **83**, 064703 (2014).
61. L. Zhu, M. Garst, A. Rosch et al., *Phys. Rev. Lett.* **91**, 066404 (2003).
62. M. Garst and A. Rosch, *Phys. Rev. B* **72**, 205129 (2005).
63. D. J. Thouless, *Phys. Rep.* **13**, 93 (1974).
64. N. C. Murphy, R. Wortis, and W. A. Atkinson, *Phys. Rev. B* **83**, 184206 (2011).
65. M. Malki and G. S. Uhrig, *Eur. Phys. Lett.* **127**, 27001 (2019).
66. А. Д. Федосеев, ЖЭТФ **160**, 88 (2021).

MOMENTUM ALIGNMENT AND THE OPTICAL VALLEY HALL EFFECT IN LOW-DIMENSIONAL DIRAC MATERIALS

V. A. Saroka^{a,b}, R. R. Hartmann^c, M. E. Portnoi^{a*}

^a *Physics and Astronomy, University of Exeter, Stocker Road, Exeter EX4 4QL, United Kingdom*

^b *Institute for Nuclear Problems, Belarusian State University, 220030, Minsk, Belarus*

^c *Physics Department, De La Salle University, 0922 Manila, Philippines*

Received June 2, 2022,
revised version June 9, 2022
Accepted June 10, 2022

Contribution for the JETP special issue in honor of E. I. Rashba's 95th birthday

DOI: 10.31857/S004445102210011X

EDN: JTNVUO

One of the best-known properties of graphene is its universal optical absorption for a broad range of frequencies [1]. It is less-known that a linearly polarized excitation creates in graphene-like materials a strongly anisotropic distribution of photoexcited carriers, with their momenta aligned preferentially normal to the polarization plane, allowing one to effectively steer the direction of electrons by light [2]. This largely overlooked effect is the central theme of our paper. A similar momentum alignment phenomenon occurs in bulk GaAs-type semiconductors [3] and quantum wells [4–8], where the electrons created by the interband absorption of linearly polarized light are also distributed anisotropically in momentum space; the same selection rules govern polarization properties of quantum-well-based lasers [9]. In conventional semiconductors the alignment is due to the spin-orbit interaction, whereas in graphene, it is due to the pseudo-spin. Namely, the ratio of the two components of the spinor-like graphene wavefunction depends on the direction of momentum which influences the optical transition selection rules. Unlike semiconductors where most optical phenomena are associated with the band edge transitions, photoexcited carriers in graphene are always created with a significant value of momentum and a linearly polarized excitation results in strong momentum anisotropy for all excitation energies. Momentum alignment in graphene was first discussed in Ref. [2] followed by a number of

papers mostly dealing with the photogalvanic effect see, e.g., Ref. [10] and references therein. Notably, in this paper we do not deal with photocurrents largely influenced by relaxation processes [11], rather, we focus on the selection rules and the shape of the momentum distribution function at the instant of photoexcitation.

In graphene and graphene-like two-dimensional (2D) Dirac materials, such as single layers of group-VI dichalcogenides [12, 13] and elemental analogues of graphene [14, 15] including silicene, germanene, stanene and several others, the electronic properties can be described in terms of particles belonging to two valleys [16], centered around the symmetry points \mathbf{K} and \mathbf{K}' . These points are nonequivalent and degenerate in terms of energy. This degree of degeneracy is the so-called valley degree of freedom. It has been proposed that this additional quantum number can be utilized in an analogous manner to spin in semiconductor spintronics [17] and has been suggested as a basis for carrying information in graphene-based devices [18]. For gapped 2D Dirac materials, excitation by linearly polarized light with a photon energy just above the band gap results in an equal population of both valleys. However, as we show below, at higher excitation energies, the trigonal warping effect (an anisotropy of the equal-energy contour) in conjunction with momentum alignment can be utilized to spatially separate carriers belonging to different valleys, thus providing a route to optovalleytronics — the optical control of valley population. This optical valley Hall effect becomes stronger as the photon energy increases.

* E-mail: M.E.Portnoi@exeter.ac.uk

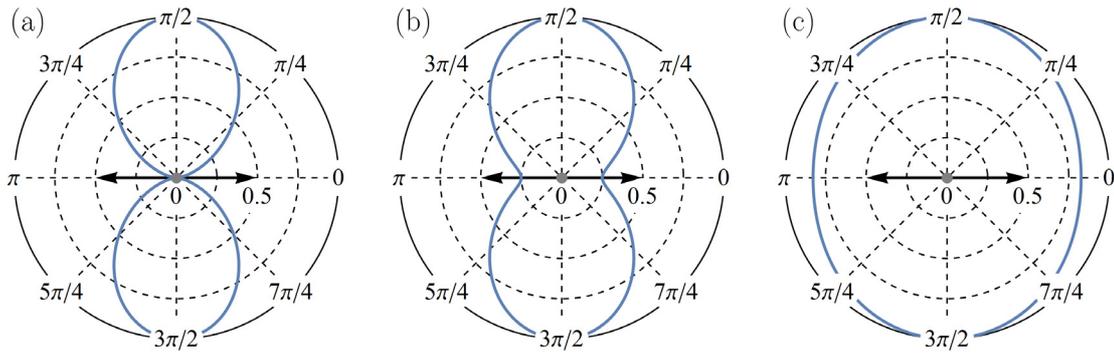


Fig. 1. The polar plots of the momentum distribution functions for (a) graphene and an isotropic gapped 2D Dirac material excited at (b) $h\nu = 2E_g$ and (c) $h\nu = 1.1E_g$, for $\phi = 0$. Here, the black arrow represents the polarization of the excitation, which is assumed to be along the x -axis

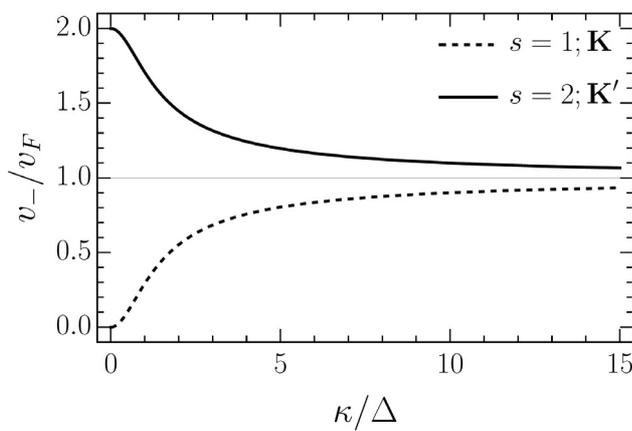


Fig. 2. The absolute value of the matrix element of the velocity operator associated with interband transitions induced by right-handed circularly polarized light as a function of excitation energy. The lower and upper curves correspond to the \mathbf{K} and \mathbf{K}' valleys, respectively

In gapless 2D materials, such as graphene, in addition to the aforementioned trigonal warping which occurs at high energies, there is a strong anisotropic modification to the spectra near the apex of the Dirac cone due to the celebrated Rashba spin-orbit effect [19–21], which is inevitable in the presence of a substrate and can be controlled by the back-gate voltage. The importance of Rashba spin-orbit interaction for graphene physics was realized by Kane and Mele [22] practically simultaneously with graphene exfoliation which was followed by an extensive body of research including important contributions by Rashba himself [23–25]. The presence of the Rashba term, which is significant at low energies, should result in an optical valley Hall effect occurring also at much lower far-infrared frequencies.

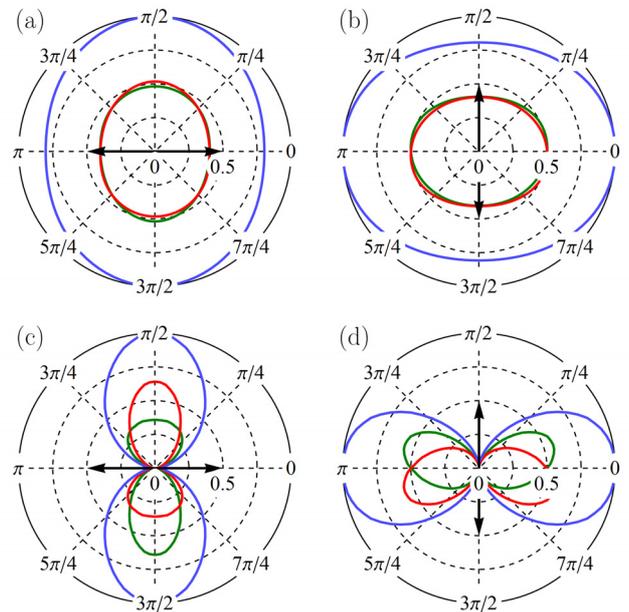


Fig. 3. The polar plots of the momentum distribution function of photoexcited carriers generated by linearly-polarized light in a gapped graphene-like crystal when the trigonal warping is taken into account for: (a) $\phi = 0$, $h\nu = 1.1E_g$, and $E_g = 0.1|t|$, (b) $\phi = \pi/2$, $h\nu = 1.1E_g$, and $E_g = 0.1|t|$, (c) $\phi = 0$, $h\nu = 5E_g$, and $E_g = 0.1|t|$, (d) $\phi = \pi/2$, $h\nu = 5E_g$, and $E_g = 0.1|t|$. Here, ϕ is the angle between the excitation polarization plane and the x -axis at normal light incidence. The energy gap is given in terms of the hopping integral, $|t| \approx 3$ eV. The green and red lines show the contributions from the \mathbf{K} and \mathbf{K}' valleys, respectively, while the blue contour is their sum, and the bold black arrows represent the polarization of the excitation

In contrast to the optical spin and valley Hall effects in polaritonics [26–28], our predicted optical valley Hall effect, caused by the spatial separation of carriers be-

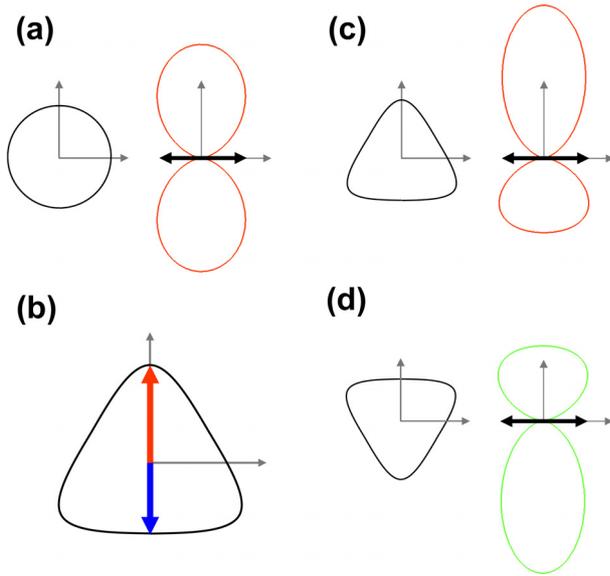


Fig. 4. (a) The polar plots of the momentum distribution of photo-excited carriers in the low-energy regime at normal light incidence when the excitation polarization plane is along the x -axis, i. e. $\phi = 0$. (b) The equienergy contour around the \mathbf{K}' point (black line), in the regime where trigonal warping becomes important. Here, the red line indicates a direction in k -space where κ is maximum, while the blue line indicates a direction in k -space where κ is minimum. The contribution to the momentum distribution of photo-excited carriers from the (c) \mathbf{K}' point and (d) \mathbf{K} point is shown. In both instances $\phi = 0$ and $\hbar\nu = 0.6|t|$. As a guide to the eye, the corresponding equienergy contours are drawn next to each distribution function and the bold black arrows represent the polarization of the excitation

longing to different valleys by linearly polarized light, does not need a microcavity. A better-known alternative route to optovalleytronics utilizes circularly polarized light in quasi-2D Dirac materials with non-zero effective mass. Unlike in gapless 2D Dirac materials, the selection rules for interband transitions for circularly polarized light in gapped graphene-like systems are strongly valley dependent. Namely, circularly polarized radiation of a specific handedness, with an energy matching the band gap, will excite electrons in one valley only. These optical transition selection rules are independent of the physical nature of the gap. The gap can be opened, e. g., by placing graphene on a matching substrate with two chemically different atoms underneath the two neighbouring carbon atoms [29, 30] or chemically-functionalized graphene [31]. The valley-dependent selection rules for circularly-polarized light can be utilized for the detection of the optical valley Hall effect. In single layers of transition metal dichalco-

genides [32] the gap is believed to be of a mixed nature, involving significantly differing on-site energies accompanied by spin-valley locking due to strong spin-orbit coupling. Thus, in these materials the optical valley Hall effect is automatically accompanied by the optical spin Hall effect.

The momentum alignment phenomenon also has profound consequences for optical transition selection rules in narrow-gap carbon nanotubes (CNTs) and graphene nanoribbons (GNRs). Namely, the angular dependence of graphene's momentum distribution function leads to a spectacular enhancement in the matrix element of optical interband transition at the band edge in these quasi-one-dimensional (1D) nanostructures. This enhancement is due to an effective quantized momentum in the direction normal to the CNT or GNR axis which governs the interband transitions when the free momentum along the axis is small. The pronounced peak in the optical matrix element at the band gap edge has a universal value which is proportional to the Fermi velocity and is independent of nature of the gap, which can be magnetic-field, curvature or edge-effect induced.

In what follows, we derive the optical selection rules for interband transitions in 2D Dirac materials for both linearly and circularly polarized excitations. In the low-energy regime and in the absence of the Rashba term, the optical selection rules for linearly-polarized excitations are shown to be valley independent; the same is true for circularly-polarized excitations in graphene. In contrast, for gapped 2D Dirac materials the optical transitions associated with circularly-polarized light are valley-dependent. The distribution of photoexcited carriers is first calculated in the absence of the Rashba term, for both the low energy regime and for the range of frequencies in which trigonal warping effects become important. Next, we show that in the presence of warping, a linearly polarized excitation will result in the spatial separation of carriers belonging to different valleys (optical valley Hall effect). An experimental set up is proposed to observe this effect in gapped 2D Dirac materials.

We then return to the low-energy part of the spectrum of gapless materials, but with the Rashba term introduced. This term results in a strong warping effect near the apex of the Dirac cone. This leads to a spectacular valley separation effect upon a linearly-polarized excitation, at a completely different photon energy scale. This energy scale can be tuned by modifying the strength of the Rashba term by changing the value of the back-gate voltage.

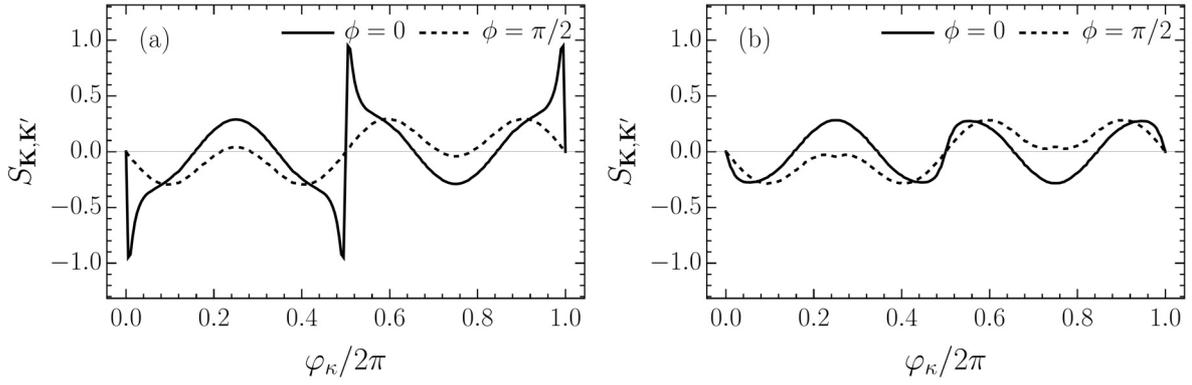


Fig. 5. The degree of valley polarization for (a) $E_g = 0$ and (b) $E_g = 0.1|t|$ for an excitation frequency of $h\nu = 0.5|t|$. The solid and dashed lines correspond to the polarization angles $\phi = 0$ and $\phi = \pi/2$ respectively

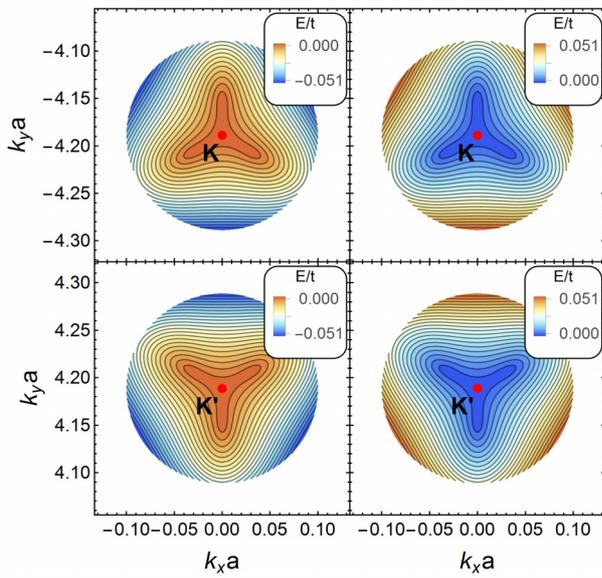


Fig. 6. The graphene valence and conduction energy bands around the \mathbf{K} and \mathbf{K}' points when Rashba spin-orbit interaction is accounted for. The Rashba coupling constant is chosen to be $\lambda_R = 0.1|t|$ in terms of the hopping integral, t

We also apply the theory of momentum alignment in graphene to quasi-1D systems such as narrow-gap CNTs and armchair GNRs (AGNRs). These systems are shown to have strong low-energy interband transitions, which are typically in the THz range [33]. Finally, we discuss the possibility for the experimental observation of the predicted strong THz transitions and how they could be used in THz emitters.

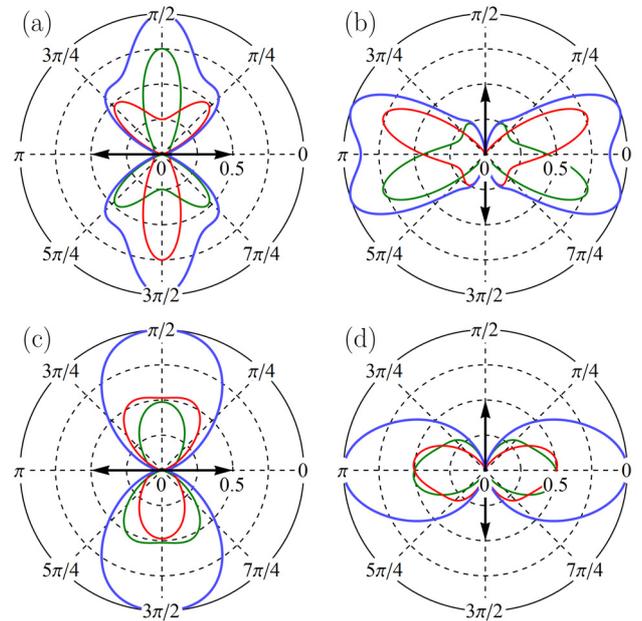


Fig. 7. The polar plots of the momentum distribution function of photoexcited carriers generated by linearly-polarized light in graphene when Rashba spin-orbit coupling is taken into account: (a) $\phi = 0$ and $h\nu = 0.05|t|$, (b) $\phi = \pi/2$ and $h\nu = 0.05|t|$, (c) $\phi = 0$ and $h\nu = 0.3|t|$, (d) $\phi = \pi/2$ and $h\nu = 0.3|t|$. Here ϕ is the angle between the excitation polarization plane and the x -axis assuming normal incidence. The Rashba coupling constant is chosen to be $\lambda_R = 0.1|t|$, where $|t| \approx 3$ eV is the hopping integral in graphene. The green and red lines show the contributions from the \mathbf{K} and \mathbf{K}' valley, respectively; while the blue contour is the total sum of valley contributions. The bold black arrows represent the polarization of the excitation

The results from the list of Refs. [1–92] are used and/or discussed in our work. The presented figures illustrate our results.

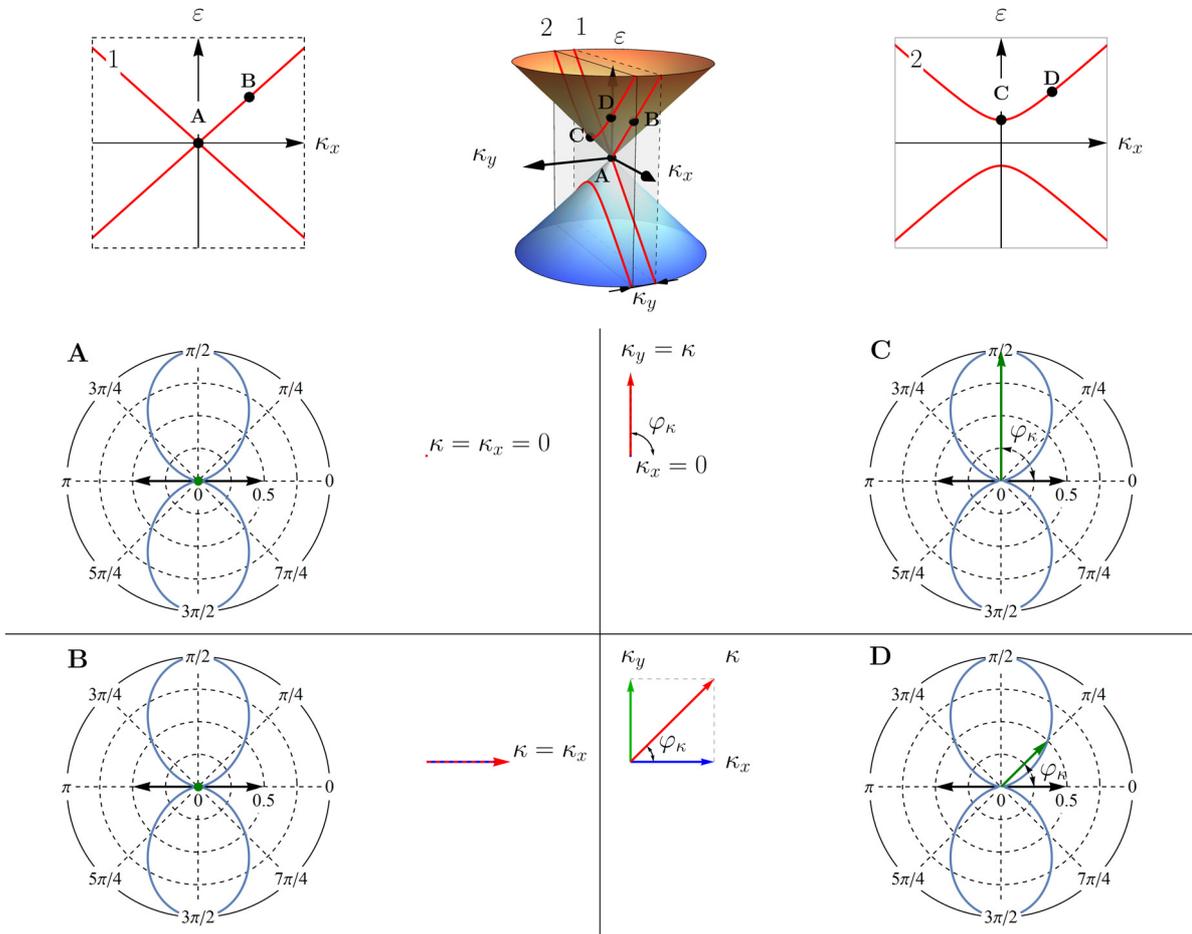


Fig. 8. Illustration of the giant enhancement of interband transitions across the narrow band gap in quasi-metallic carbon nanotubes and graphene nanoribbons explained in terms of the momentum alignment phenomenon in graphene. Each of the panels A, B, C, and D shows the dependence of the transition matrix element on the angle between the excitation polarization plane and the momentum of the photoexcited carrier, as well as the momentum vector direction. A and B correspond to the gapless case with the energy spectrum shown in the top left-hand side panel when the cross section of the cone passes through the Dirac point ($\kappa_y = 0$). As there is no momentum normal to the light polarization plane, optical transitions are totally forbidden in the conic approximation for both A ($\kappa_x = 0$) and B ($\kappa_x \neq 0$). C and D correspond to the narrow-gap case when the cross section avoids the Dirac point ($\kappa_y \neq 0$). C is for a band-edge transition when $\kappa_x = 0$ and the transition probability reaches its maximum. D corresponds to $\kappa_y \neq 0$ and $\kappa_x \neq 0$, the increase in κ_x leads to a reduction in the transition probability. The length of the dark-green arrows in the polar plots (vanishing for A and B) show the magnitude of the matrix element of transition

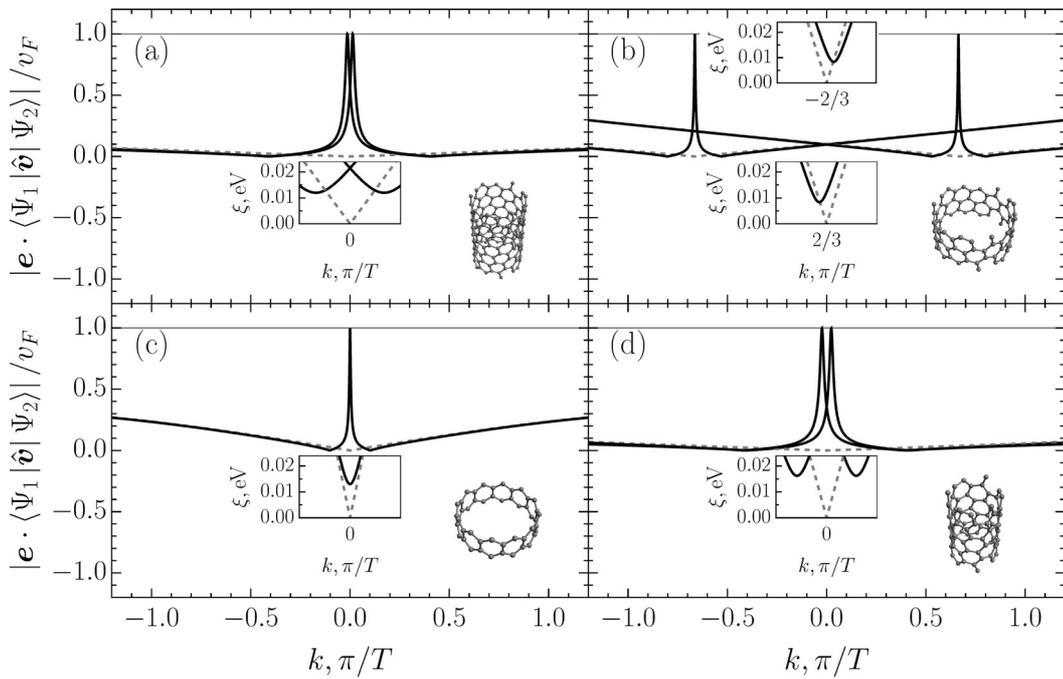


Fig. 9. The absolute value of the velocity operator matrix element with (solid black) and without (dashed grey) curvature effect for (a) CNT (9, 3); (b) CNT (12, 3); (c) CNT (12, 0), and (d) CNT (6, 3). The insets show the conduction bands in the vicinity of the Dirac point with (solid black) and without (dashed grey) curvature effect taken into account. The CNT unit cells are presented in the bottom right corner of each plot. For all chosen tubes, only the C–C bond contraction which dominates the curvature effects is accounted for. The universal character of the peak is highlighted by the solid horizontal line which marks v_F level. T is the translation period of the tube

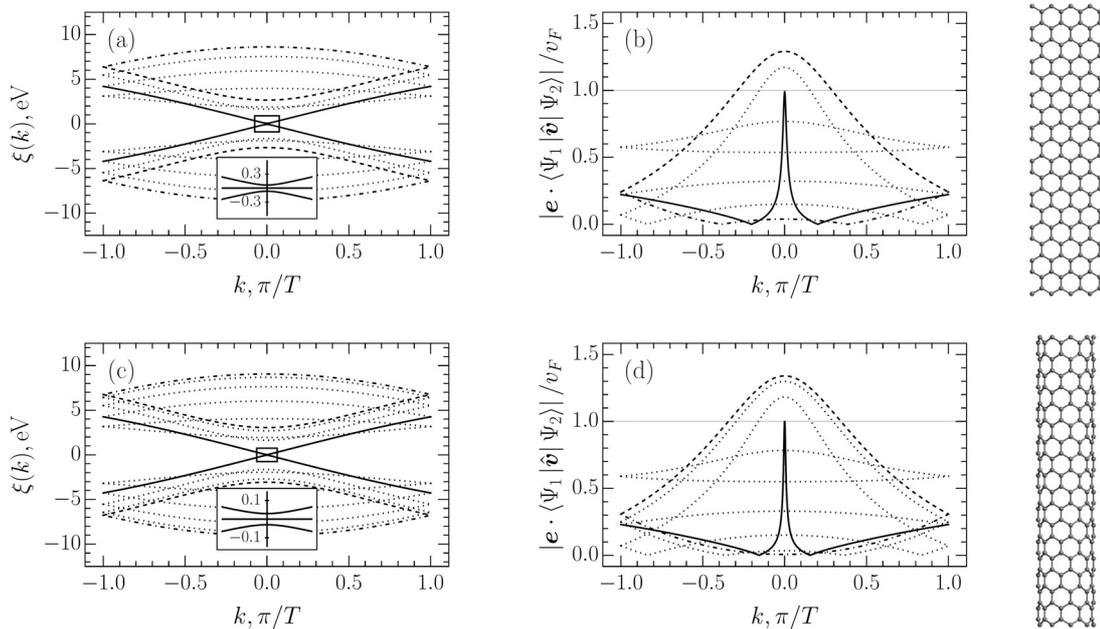


Fig. 10. (a),(c) are the band structures and (b), (d) are the velocity operator matrix elements of a AGNR(8) and zigzag CNT(9, 0), respectively. Transitions between the closest valence and conduction subbands (thick black line), the lowest and highest subbands (dashed dotted, light gray line), and for the subbands, for which velocity matrix element attains the maximum possible value (dashed, gray line), are highlighted with respect to the remaining bands and matrix elements (gray, dotted line). The insets in panels (a) and (c) show the zoomed in region close to the Dirac point where the band gap is present. In panels (b) and (d) the solid horizontal line corresponds to v_F as a guide to the eye. On the right side the atomic structures are shown. In both cases the hopping integral, $|t| \approx 3$ eV and the edge correction for the ribbon is $0.05|t|$, whereas the curvature correction for the tube is $0.01|t|$. T is the translation period of the structure

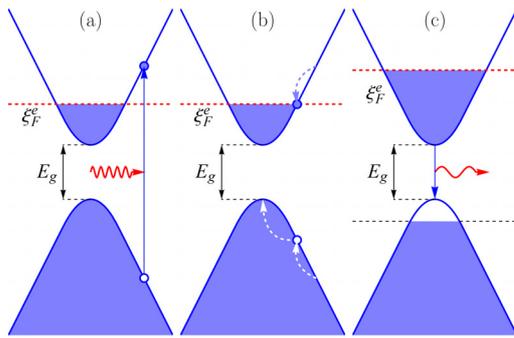


Fig. 11. A schematic illustration of (a) the high frequency optical excitation (b) non-radiative electron relaxation due to the electron-phonon scattering and (c) the population inversion in an n -doped narrow gap CNT or GNR

The full text of this paper is published in the English version of *JETP*.

REFERENCES

- R. R. Nair, P. Blake, A. N. Grigorenko, K. S. Novoselov, T. J. Booth, T. Stauber, N. M. Peres, and A. K. Geim, *Science* **320**, 1308 (2008).
- R. R. Hartmann and M. E. Portnoi, *Optoelectronic Properties of Carbon-based Nanostructures: Steering Electrons in Graphene by Electromagnetic Fields*, LAP Lambert Acad. Publ., Saarbrücken (2011); R. R. Hartmann, Ph. D. Thesis, Univ. of Exeter (2010).
- D. N. Mirlin, in *Optical Orientation*, ed. by F. Meier and B. P. Zakharchenya, North Holland, Amsterdam (1984) Ch. 4.
- I. A. Merkulov, V. I. Perel', and M. E. Portnoi, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **99**, 1202 (1991).
- D. N. Mirlin and V. I. Perel', *Semicond. Sci. Technol.* **7**, 1221 (1992).
- J. A. Kash, M. Zachau, M. A. Tischler, and U. Ekenberg, *Phys. Rev. Lett.* **69**, 2260 (1992).
- M. E. Portnoi, *Sov. Phys. Semicond.* **25**, 1294 (1991).
- V. I. Perel' and M. E. Portnoi, *Sov. Phys. Semicond.* **26**, 1185 (1992).
- E. A. Avrutin, I. E. Chebunina, I. A. Eliachevitch, S. A. Gurevich, M. E. Portnoi, and G. E. Shtengel, *Semicond. Sci. Technol.* **8**, 80 (1993).
- M. V. Durnev and S. A. Tarasenko, *Phys. Rev. B* **103**, 165411 (2021).
- L. E. Golub, S. A. Tarasenko, M. V. Entin, and L. I. Magarill, *Phys. Rev. B* **84**, 195408 (2011).
- D. Xiao, G.-B. Liu, W. Feng, X. Xu, and W. Yao, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 196802 (2012).
- A. Kormányos, G. Burkard, M. Gmitra, J. Fabian, V. Zólyomi, N. D. Drummond, and V. Fal'ko, *2D Mater.* **2**, 022001 (2015).
- S. Balendhran, S. Walia, H. Nili, S. Sriram, and M. Bhaskaran, *Small* **11**, 640 (2015).
- Z. Ni, E. Minamitani, Y. Ando, and S. Watanabe, *Phys. Rev. B* **96**, 075427 (2017).
- J. R. Schaibley, H. Yu, G. Clark, P. Rivera, J. S. Ross, K. L. Seyler, W. Yao, and X. Xu, *Nature Rev. Mater.* **1**, 16055 (2016).
- J. F. I. Žutić and S. D. Sarma, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 323 (2004).
- A. Rycerz, J. Tworzydło, and C. W. J. Beenakker, *Nature Phys.* **3**, 172 (2007).
- E. I. Rashba, *Sov. Phys. Solid State* **2**, 1109 (1960).
- Yu. A. Bychkov and E. I. Rashba, *J. Phys. C: Sol. St. Phys.* **17**, 6039 (1984).
- G. Bihlmayer, O. Rader, and R. Winkler, *New J. Phys.* **17**, 050202 (2015).
- C. L. Kane and E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 146802 (2005).
- E. I. Rashba, *Phys. Rev. B* **79**, 161409 (2009).
- F. Kuemmeth and E. I. Rashba, *Phys. Rev. B* **80**, 241409 (2009).
- D. Marchenko, A. Varykhalov, M. Scholz, G. Bihlmayer, E. Rashba, A. Rybkin, A. Shikin, and O. Rader, *Nature Commun.* **3**, 1232 (2012).
- A. Kavokin, G. Malpuech, and M. Glazov, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 136601 (2005).
- C. Leyder, M. Romanelli, J. P. Karr, E. Giacobino, T. C. Liew, M. M. Glazov, A. V. Kavokin, G. Malpuech, and A. Bramati, *Nature Phys.* **3**, 628 (2007).
- O. Bleu, D. D. Solnyshkov, and G. Malpuech, *Phys. Rev. B* **96**, 165432 (2017).
- G. Giovannetti, P. A. Khomyakov, G. Brocks, P. J. Kelly, and J. van den Brink, *Phys. Rev. B* **76**, 073103 (2007).

30. S. Y. Zhou, G.-H. Gweon, A. V. Fedorov, P. N. First, W. A. de Heer, D.-H. Lee, F. Guinea, A. H. Castro Neto, and A. Lanzara, *Nature Mater.* **6**, 770 (2007).
31. M. F. Craciun, I. Khrapach, M. D. Barnes, and S. Russo, *J. Phys.: Condens. Matter* **25**, 423201 (2013).
32. S. Manzeli, D. Ovchinnikov, D. Pasquier, O. V. Yazyev, and A. Kis, *Nature Rev. Mater.* **2**, 17033 (2017).
33. M. E. Portnoi, V. A. Saroka, R. R. Hartmann, and O. V. Kibis, in *2015 IEEE Comput. Soc. Annu. Symp. VLSI* (IEEE, 2015), p. 456.
34. R. Saito, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus, *Physical Properties of Carbon Nanotubes*, Imperial College Press, London (1998).
35. J. Sichau, M. Prada, T. Anlauf, T. J. Lyon, B. Bosnjak, L. Tiemann, and R. H. Blick, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 046403 (2019).
36. W. Yao, D. Xiao, and Q. Niu, *Phys. Rev. B* **77**, 235406 (2008).
37. A. Mattausch and O. Pankratov, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 076802 (2007).
38. C. C. Liu, H. Jiang, and Y. Ya, *Phys. Rev. B* **84**, 195430 (2011).
39. V. A. Saroka, M. V. Shuba, and M. E. Portnoi, *Phys. Rev. B* **95**, 155438 (2017).
40. A. B. Kuzmenko, E. van Heumen, F. Carbone, and D. van der Marel, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 117401 (2008).
41. M. Koshino and T. Ando, *Phys. Rev. B* **77**, 115313 (2008).
42. V. Ryzhii, M. Ryzhii, and T. Otsuji, *J. Appl. Phys.* **101**, 083114 (2007).
43. T. Stauber, N. M. R. Peres, and A. K. Geim, *Phys. Rev. B* **78**, 085432 (2008).
44. M. E. Portnoi, *Semiconductors* **27**, 294 (1993).
45. D. S. Kainth, M. N. Khalid, and H. P. Hughes, *Sol. St. Commun.* **122**, 351 (2002).
46. I. A. Merkulov, V. I. Perel, and M. E. Portnoi, *Superlattices Microstr.* **10**, 371 (1991).
47. K. F. Mak, C. Lee, J. Hone, J. Shan, and T. F. Heinz, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 136805 (2010).
48. X. Xu, W. Yao, D. Xiao, and T. F. Heinz, *Nature Phys.* **10**, 343 (2014).
49. E. McCann, K. Kechedzhi, V. I. Fal'ko, H. Suzuura, T. Ando, and B. L. Altshuler, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 146805 (2006).
50. F. V. Tikhonenko, D. W. Horsell, R. V. Gorbachev, and A. K. Savchenko, *Phys. Rev. Lett.* **100**, 056802 (2008).
51. L. Brey and H. Fertig, *Phys. Rev. B* **73**, 235411 (2006).
52. M. I. D'yakonov and V. I. Perel', *Sov. Phys. JETP Lett.* **13**, 467 (1971).
53. M. I. Dyakonov and V. I. Perel', *Phys. Lett. A* **35**, 459 (1971).
54. J. Sinova, S. O. Valenzuela, J. Wunderlich, C. H. Back, and T. Jungwirth, *Rev. Mod. Phys.* **87**, 1213 (2015).
55. M. Zarea and N. Sandler, *Phys. Rev. B* **79**, 165442 (2009).
56. G. G. Samsonidze, R. Saito, A. Jorio, M. A. Pimenta, A. G. Souza Filho, A. Grüneis, G. Dresselhaus, and M. S. Dresselhaus, *J. Nanosci. Nanotechnol.* **3**, 431 (2003).
57. C. L. Kane and E. Mele, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1932 (1997).
58. C. Zhou, J. Kong, and H. Dai, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 5604 (2000).
59. M. Ouyang, J. L. Huang, C. L. Cheung, and C. M. Lieber, *Science* **292**, 702 (2001).
60. F. L. Shyu and M. F. Lin, *J. Phys. Soc. Jpn.* **71**, 1820 (2002).
61. P. N. D'yachkov, *Russ. J. Inorg. Chem.* **63**, 55 (2018).
62. M. E. Portnoi, M. Rosenau da Costa, O. V. Kibis, and I. A. Shelykh, *Int. J. Mod. Phys. B* **23**, 2846 (2009).
63. R. Moradian, R. Chegel, and S. Behzad, *Physica E: Low-dimens. Syst. Nanostruct.* **42**, 1850 (2010).
64. R. Chegel and S. Behzad, *Opt. Commun.* **313**, 406 (2014).
65. R. R. Hartmann and M. E. Portnoi, *IOP Conf. Ser.: Mater. Sci. Eng.* **79**, 012014 (2015).
66. O. V. Kibis, M. Rosenau da Costa, and M. E. Portnoi, *Nano Lett.* **7**, 3414 (2007).
67. R. R. Hartmann, J. Kono, and M. E. Portnoi, *Nanotechnology* **25**, 322001 (2014).

68. C. T. White, J. Li, D. Gunlycke, and J. W. Mintmire, *Nano Lett.* **7**, 825 (2007).
69. V. A. Saroka, A. L. Pushkarchuk, S. A. Kuten, and M. E. Portnoi, *J. Saudi Chem. Soc.* **22**, 985 (2018).
70. H. Zheng, Z. Wang, T. Luo, Q. Shi, and J. Chen, *Phys. Rev. B* **75**, 165414 (2007).
71. L. A. Chernozatonskii, P. B. Sorokin, and J. W. Brün-
ing, *Appl. Phys. Lett.* **91**, 183103 (2007).
72. L. A. Chernozatonskii and P. B. Sorokin, *J. Phys.*
Chem. C **114**, 3225 (2010).
73. R. R. Hartmann, V. A. Saroka, and M. E. Portnoi,
J. Appl. Phys. **125**, 151607 (2019).
74. T. Kampfrath, K. von Volkman, C. M. Aguirre,
P. Desjardins, R. Martel, M. Krenz, C. Frischkorn,
M. Wolf, and L. Perfetti, *Phys. Rev. Lett.* **101**,
267403 (2008).
75. A. Ugawa, A. G. Rinzier, and D. B. Tanner, *Phys.*
Rev. B **60**, 11305 (1999).
76. G. Y. Slepian, M. V. Shuba, S. A. Maksimenko,
C. Thomsen, and A. Lakhtakia, *Phys. Rev. B* **81**,
205423 (2010).
77. M. V. Shuba, A. G. Paddubskaya, A. O. Plyushch,
P. P. Kuzhir, G. Y. Slepian, S. A. Maksimenko,
V. K. Ksenevich, P. Buka, D. Seliuta, I. Kasaly-
nas, J. Macutkevici, G. Valusis, C. Thomsen, and
A. Lakhtakia, *Phys. Rev. B* **85**, 165435 (2012).
78. L. Ren, Q. Zhang, C. L. Pint, A. K. Wójcik,
M. Bunney, T. Arikawa, I. Kawayama, M. Tonouchi,
R. H. Hauge, A. A. Belyanin, and J. Kono, *Phys.*
Rev. B **87**, 161401 (2013).
79. J.-Y. Park, S. Rosenblatt, Y. Yaish, V. Sazonova, H.
Üstünel, S. Braig, T. A. Arias, P. W. Brouwer, and
P. L. McEuen, *Nano Lett.* **4**, 517 (2004).
80. C. Chang, Y. Huang, C. Lu, J. Ho, T. Li, and M. Lin,
Carbon N. Y. **44**, 508 (2006).
81. V. A. Saroka, K. G. Batrakov, V. A. Demin, and
L. A. Chernozatonskii, *J. Phys.: Condens. Matter*
27, 145305 (2015).
82. L. V. Titova, C. L. Pint, Q. Zhang, R. H. Hauge,
J. Kono, and F. A. Hegmann, *Nano Lett.* **15**, 3267
(2015).
83. J. Shaver and J. Kono, *Laser Photon. Rev.* **1**, 260
(2007).
84. R. Denk, M. Hohage, P. Zeppenfeld, J. Cai,
C. A. Pignedoli, H. Söde, R. Fasel, X. Feng, K.
Müllen, S. Wang, D. Prezzi, A. Ferretti, A. Ruini,
E. Molinari, and P. Ruffieux, *Nature Commun.* **5**,
4253 (2014).
85. R. R. Hartmann, I. A. Shelykh, and M. E. Portnoi,
Phys. Rev. B **84**, 035437 (2011).
86. R. R. Hartmann and M. E. Portnoi, *Phys. Rev. A* **95**,
062110 (2017).
87. A. Srivastava, H. Htoon, V. I. Klimov, and J. Kono,
Phys. Rev. Lett. **101**, 087402 (2008).
88. X. He, H. Htoon, S. K. Doorn, W. H. P. Pernice,
F. Pyatkov, R. Krupke, A. Jeantet, Y. Chassagneux,
and C. Voisin, *Nature Mater.* **17**, 843 (2018).
89. W. Gao, X. Li, M. Bamba, and J. Kono, *Nature Pho-*
ton. **12**, 362 (2018).
90. D. Headland, T. Niu, E. Carrasco, D. Abbott, S. Sri-
ram, M. Bhaskaran, C. Fumeaux, and W. Withay-
achumnankul, *IEEE J. Sel. Top. Quant. Electron.* **23**,
8500918 (2017).
91. H. Zhang, H. Lin, K. Sun, L. Chen, Y. Zagranyski,
N. Aghdassi, S. Duhm, Q. Li, D. Zhong, Y. Li, K.
Müllen, H. Fuchs, and L. Chi, *J. Amer. Chem. Soc.*
137, 4022 (2015).
92. W. Gao and J. Kono, *Roy. Soc. Open Sci.* **6**, 181605
(2019).

SPIN-DEPENDENT ELECTRON–ELECTRON INTERACTION IN RASHBA MATERIALS

Y. Gindikin^{a*}, *V. A. Sablikov*^b

^a *Department of Condensed Matter Physics, Weizmann Institute of Science
76100, Rehovot, Israel*

^b *Kotelnikov Institute of Radio Engineering and Electronics, Fryazino branch, Russian Academy of Sciences
141190, Fryazino, Moscow region, Russia*

Received June 24, 2022,
revised version June 24, 2022
Accepted June 26, 2022

Contribution for the JETP special issue in honor of E. I. Rashba's 95th birthday

DOI: 10.31857/S0044451022100121

EDN: JTOHDW

Abstract. We review the effects of the pair spin-orbit interaction (PSOI) in Rashba materials. The PSOI is the electron–electron interaction component that depends on the spin and momentum of the electrons. Being produced by the Coulomb fields of interacting electrons, it exists already in vacuum, but becomes orders of magnitude larger in materials with the giant Rashba effect. The main nontrivial feature of the PSOI is that it is attractive for electrons in certain spin configurations tied to their momentum and competes with the Coulomb repulsion of the electrons. Under certain conditions attainable in modern low-dimensional structures the PSOI prevails. The resulting attraction between electrons leads to the formation of bound electron pairs, the binding energy of which can be controlled by electrical means. In many-electron systems the PSOI results in the instabilities of the uniform ground state with respect to the density fluctuations, which develop on different spatial scales, depending on the geometry of the electric fields that produce the PSOI. If the PSOI is not too strong the electronic system is stable, but its collective excitations reveal the highly unusual spin-charge structure and spectrum, which manifest themselves in the frequency dependence of the dynamic conductivity.

INTRODUCTION

From the early days of relativistic quantum mechanics it is known that the electrostatic Coulomb potential is insufficient to describe the interaction between electrons, and in the first quasi-relativistic approximation the potential of the electron–electron (e – e) interaction in addition to the purely Coulomb component $\mathcal{U}(\mathbf{r})$ contains a contribution that depends on the spin of the electrons and on their momenta [1],

$$\hat{H}_{PSOI} = \frac{\alpha}{\hbar} \sum_{i \neq j} [\mathcal{E}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \times \hat{\mathbf{p}}_i] \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}_i, \quad (1)$$

where $\mathcal{E}(\mathbf{r}) = (1/e)\nabla_{\mathbf{r}}\mathcal{U}(\mathbf{r})$ is the Coulomb field of e – e interaction, $\hat{\mathbf{p}}_i$ is the momentum operator of the i -th electron, $\hat{\boldsymbol{\sigma}} \equiv (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ is the Pauli vector. This contribution is usually referred to as the pair spin-orbit interaction (PSOI). In vacuum its magnitude $\alpha = e\lambda^2/4$ is set by the square of the Compton length λ , that is relativistically small.

In crystalline solids the situation fundamentally changes due to the features of the band states, which under certain conditions lead to an extremely strong spin-orbit interaction (SOI) that depends on the electric field external to the crystalline one, including the Coulomb field of interacting electrons. This typically occurs as a result of the combined effect of momentum-dependent mixing of electron and hole subbands split by intra-atomic SOI and symmetry breaking created by the electric field [2]. At present, the circle of these Rashba materials is very wide and the SOI parameter reaches gigantic values [3, 4].

* E-mail: iakov.gindikin@weizmann.ac.il

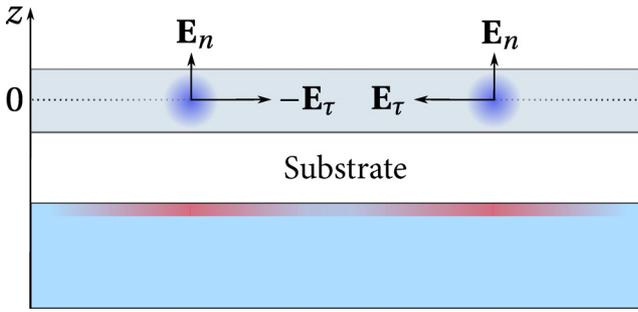


Fig. 1. A 2D layer with a proximate gate. Each electron experiences the electric fields from the neighboring electrons, the polarization charges, and the total charge of the gate

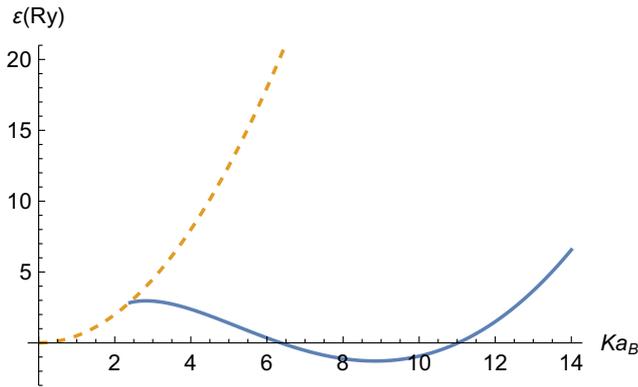


Fig. 2. The energy level of the convective BEP (solid line) and the kinetic energy of the center of mass (dashed line) vs Ka_B for $\tilde{\alpha} = 1$

The Rashba constant α of the currently known materials with giant SOI varies from 10^2 e\AA^2 in InAs to 10^3 e\AA^2 in such materials as Bi_2Se_3 [5], the monolayers of BiSb [6], the oxide heterostructures and films [7]. In such materials, mainly two-dimensional ones, the PSOI

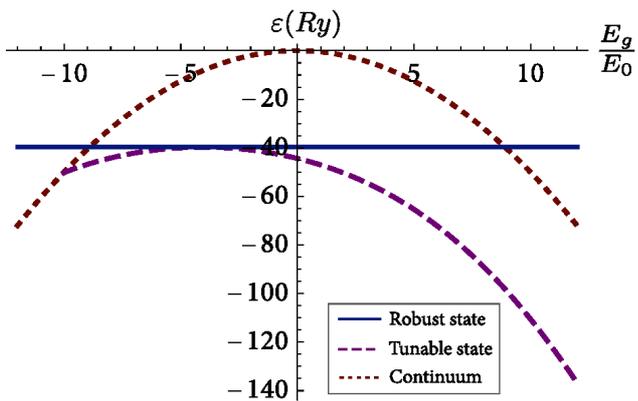


Fig. 3. The binding energy of the robust and tunable BEPs as well as the continuum boundary vs the gate field E_g normalized at $E_0 = e/2\epsilon a_B^2$

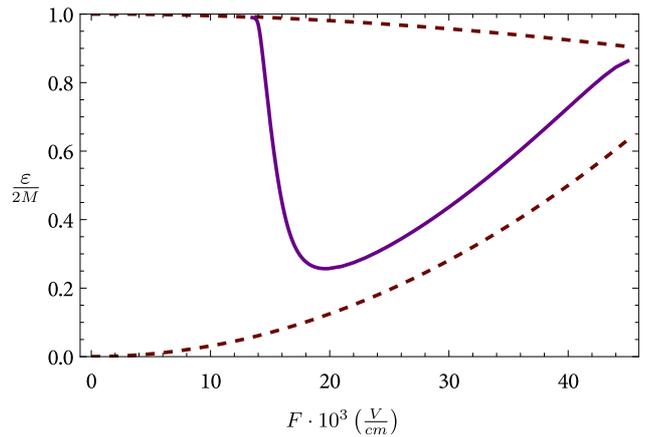


Fig. 4. The BEP energy level as a function of the gate electric field F . The continuum boundaries are shown by the dashed lines

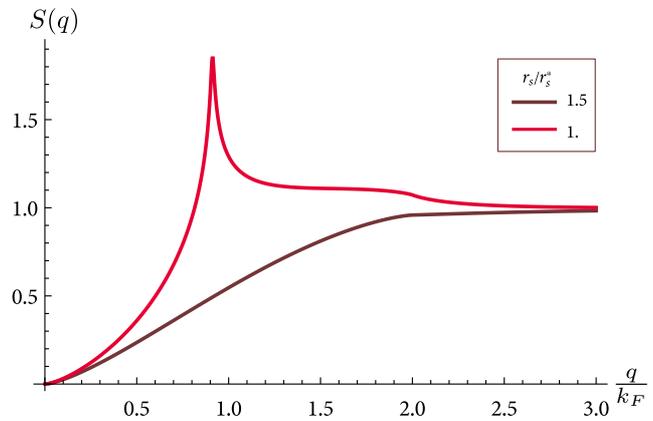


Fig. 5. The structure factor $S(q)$ as a function of q for two values of the r_s parameter. The Rashba constant is $\tilde{\alpha} = 0.1$, which corresponds to $r_s^* = 0.3$

is described by the same Hamiltonian as of Eq. (1), and for a sufficiently smooth potential $\mathcal{U}(r)$ the value of the α parameter is estimated at the level of the Rashba constant in a given material.

A distinctive feature of the PSOI as compared to the Coulomb interaction is that it is determined by the electric field $\mathcal{E}(r) \sim r^{-2}$, which grows faster than the potential $\mathcal{U}(r) \sim r^{-1}$ when we bring two electrons closer together. Hence there appears a new characteristic scale of $r = \sqrt{\alpha/e}$ where the PSOI prevails over the Coulomb interaction. This scale can be large enough in modern heterostructures based on $\text{LaAlO}_3/\text{SrTiO}_3$ [8,9], in specifically crafted structures based on two-dimensional (2D) layers of van der Waals materials with heavy adatoms [10,11], etc.

Most importantly, several related scales due to the competition of the PSOI and Coulomb interaction arise

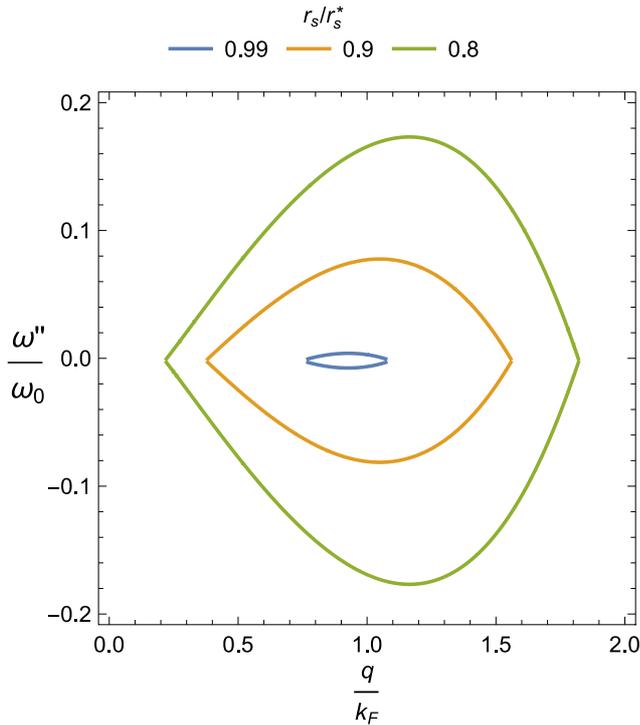


Fig. 6. The imaginary part of the frequency of a new solution of the dispersion equation due to the PSOI as a function of wave vector. The dispersion line is shown for three values of r_s to trace how the instability develops in the system with increasing the PSOI interaction parameter of $\tilde{\alpha}/r_s$. The Rashba constant equals $\tilde{\alpha} = 0.1$, which corresponds to $r_s^* = 0.3$

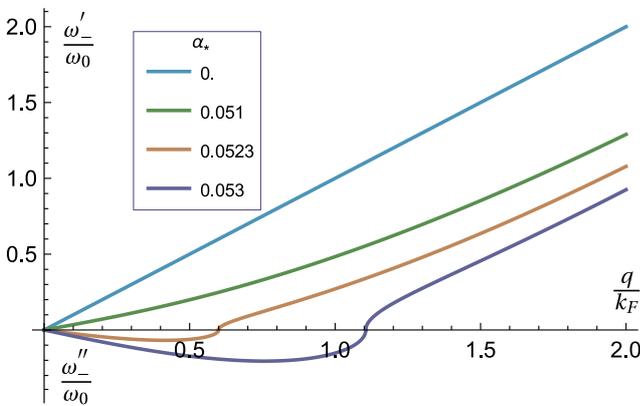


Fig. 7. The real (ω'_-) and imaginary (ω''_-) parts of the frequency of the collective mode as a function of the wave vector for several values of the PSOI constant. The frequency is normalized to $\omega_0 = v_F k_F$

in many-electron systems, regulated by the electron concentration, density of states, and a particular geometry of the electric fields that generate the PSOI. The dependence of the pair interaction on the geometric configuration of the electric fields is not uncommon, for

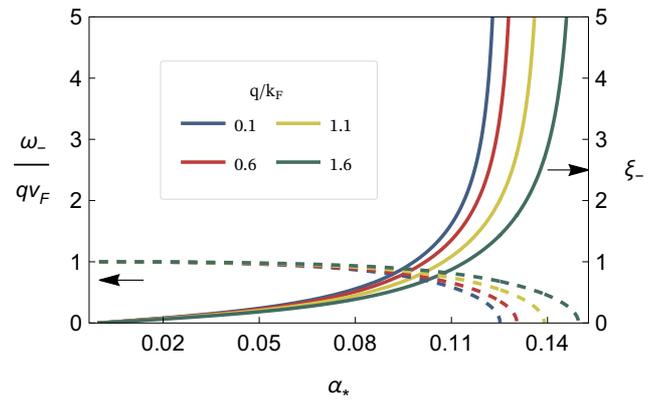


Fig. 8. The spin-charge separation parameter (solid line) and normalized phase velocity (dashed line) for the ω_- branch of collective excitations as a function of the PSOI interaction parameter for several q

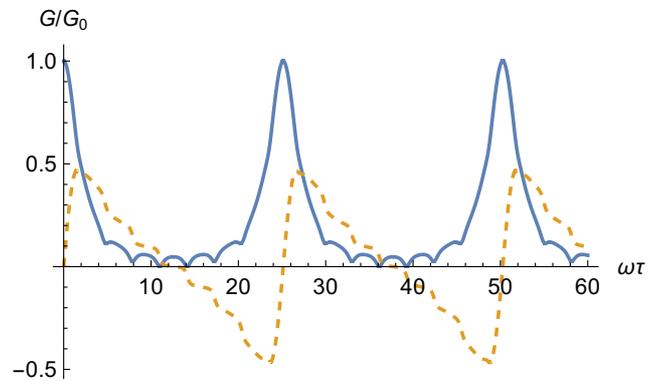


Fig. 9. The real (solid line) and imaginary (dashed line) admittance components vs frequency

example, in the physics of excitons in thin films [12,13], but here it is much more pronounced as the PSOI is generated not by a scalar potential, but by a vector field, which gives rise to more possibilities.

Qualitatively new physical effects arise on these spatial scales because the PSOI proves to be attractive for a certain spin configuration of electrons tied to their momenta. The attraction has a clear origin. The PSOI due to the electric field of a given electron lowers down the energy of another electron, provided that the latter is in a particular spin orientation relative to its momentum. This effect gets stronger as the distance between electrons decreases, which means the attraction arises between the electrons. When the PSOI becomes larger than or comparable with the Coulomb repulsion, a wide scope opens up for many non-trivial effects both at the few-particle level and collective phenomena in the systems of many particles.

Our manuscript is divided into 4 sections. After this introduction, in Sec. 2 of the full text of this paper, we review the formation of a bound electron pair (BEP) due to the attractive interaction of two electrons [14–17]. There appears an interesting problem of their binding energy and possible types of spin-charge structure. This is a highly nontrivial issue, since the interaction is attractive only for certain spin and momentum configurations.

Section 3 is devoted to the problem of a many-particle correlated state formed owing to the PSOI. The presence of the Coulomb interaction simultaneously with the PSOI greatly complicates the problem, moreover, the studies carried out to date [18, 19] show that the sufficiently strong PSOI leads to an instability of the homogeneous state of the system and therefore it is necessary to find out the adequate stabilizing mechanisms. At the present stage, studies were focused on the collective excitations under conditions where the PSOI is not too strong, but the system can approach the instability threshold. In this way, the spectrum and structure of the collective modes can be elucidated and the spectral functions of electronic fluctuations leading to the loss of stability can be found. Such studies were carried out for two specific situations of one-dimensional (1D) and two-dimensional (2D) systems.

In 1D quantum wires, collective excitations have been studied when the PSOI is produced by the image charges on a nearby gate [18]. It was found that the spectrum of collective modes contains two branches with a mixed spin-charge structure, the composition of which strongly depends on the magnitude of the PSOI. Of most interest is the behavior of one of them, which originates from the spinon branch in the absence of the PSOI. As the PSOI parameter increases, this mode strongly softens and ultimately leads to the instability of the system in the long-wavelength region of the spectrum. At the same time, its structure changes continuously from purely spin-like to purely plasmon-like.

In the direction of 2D systems, the situation of an electron gas with the in-plane mirror symmetry was studied. In this case an unconventional correlated electronic state is found to arise due to the PSOI. This state is characterized by a sharp peak in the structure factor, indicating a tendency to form a striped structure with a certain spatial scale set by the competition between the Coulomb repulsion and the PSOI-induced attraction of electrons. The system becomes unstable on this scale if the density of electrons is larger than critical [19]. Interestingly, the fluctuations that grow rapidly as the system approaches the instability thresh-

old consist mainly of the charge density fluctuations, just like in the 1D case.

The last Sec. 4 summarizes the main results discussed in our review and provides an outlook for the most prospective direction of the future research.

The results from the list of Refs. [1–30] are used or/and discussed in our work. The figures illustrating our results are presented below.

CONCLUSION AND OUTLOOK

The pair spin-orbit interaction between the electrons, which is usually considered relativistically weak, becomes extremely strong in modern materials with a strong Rashba spin-orbit interaction. The giant PSOI in Rashba materials is of slightly different nature as compared to that known in relativistic quantum mechanics, although it certainly has a relativistic origin. It arises because of the Rashba effect — the combined effect of the momentum-dependent hybridization of the electron subband with other subbands split due to the intra-atomic spin-orbit interaction, and the inversion symmetry breaking produced by an electrical field, in this case, the Coulomb field of interacting electrons.

PSOI has two main features:

- PSOI leads to the attraction of electrons for certain configurations of the spins relative to their momenta;
- the magnitude of the PSOI is determined by the electric field of the interacting electrons and hence increases with decreasing distance between them much faster than the interaction potential.

Owing to these features, strong PSOI opens up wide prospects for the appearance of many nontrivial effects due to the formation of new strongly correlated states of electrons, which are still very poorly understood. According to the studies conducted to date, such effects are manifested for sufficiently strong Rashba SOI, which is apparently attained in the already available materials. Because of the impressive progress in the creation of new low-dimensional materials with a giant SOI, theoretical studies of such states are very important.

Nontrivial effects arise at the level of systems with few particles, as well as in many-particle systems.

PSOI leads to the formation of bound pairs of electrons with various properties, depending on the screening conditions and the presence of the SOI induced by the gate potential. An attractive feature of such states

is the possibility to achieve a high binding energy of the pairs and to control their spectrum. Prospects for further research in this direction are associated primarily with the investigation of the stability of such pairs with respect to the interaction with other electrons and to the formation of more complex electron aggregations.

In many-particle systems the PSOI, even if not very strong, dramatically affects the spectra of the collective excitations and their spin-charge structure. Of particular interest is the softening of the collective modes due to the attraction between the electrons in certain spin configurations, which is produced by the PSOI and is accompanied by a rearrangement of the structure of electron correlations. Such studies for 2D systems at the current stage reveal a lot of interesting things. But of most importance is the fact that at a sufficiently strong PSOI the uniform state of a many-electron system becomes unstable. The structure of growing fluctuations indicates a tendency towards the formation of an inhomogeneous stripe phase. The search for the stabilization mechanisms and possible structures of the stable state is an open question most promising for further research.

Acknowledgments. Y.G. gratefully acknowledges the support and hospitality of the Weizmann Institute of Science during his stay there.

Funding. The work of V. A. S. was carried out in the framework of the state task for the Kotelnikov Institute of Radio Engineering and Electronics and partially supported by the Russian Foundation for Basic Research, Project No. 20-02-00126.

The full text of this paper is published in the English version of JETP.

REFERENCES

1. H. A. Bethe and E. E. Salpeter, *Quantum Mechanics of One- and Two-Electron Atoms*, Springer, Berlin (1957).
2. Y. A. Bychkov and E. I. Rashba, *JETP Lett.* **39**, 78 (1984).
3. A. Manchon, H. C. Koo, J. Nitta, S. M. Frolov, and R. A. Duine, *Nature Mater.* **14**, 871 (2015).
4. G. Bihlmayer, O. Rader, and R. Winkler, *New J. Phys.* **17**, 050202 (2015).
5. P. D. C. King, R. C. Hatch, M. Bianchi, R. Ovsyannikov, C. Lupulescu, G. Landolt, B. Slomski, J. H. Dil, D. Guan, J. L. Mi, E. D. L. Rienks, J. Fink, A. Lindblad, S. Svensson, S. Bao, G. Balakrishnan, B. B. Iversen, J. Osterwalder, W. Eberhardt, F. Baumberger, and P. Hofmann, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 096802 (2011).
6. S. Singh and A. H. Romero, *Phys. Rev. B* **95**, 165444 (2017).
7. J. Varignon, L. Vila, A. Barthelemy, and M. Bibes, *Nature Phys.* **14**, 322 (2018).
8. G. Cheng, M. Tomczyk, S. Lu, J. P. Veazey, M. Huang, P. Irvin, S. Ryu, H. Lee, C.-B. Eom, C. S. Hellberg, and J. Levy, *Nature* **521**, 196 (2015).
9. A. Annadi, G. Cheng, H. Lee, J.-W. Lee, S. Lu, A. Tylan-Tyler, M. Briggeman, M. Tomczyk, M. Huang, D. Pekker, C.-B. Eom, P. Irvin, and J. Levy, *Nano Lett.* **18**, 4473 (2018).
10. M. M. Otrokov, I. I. Klimovskikh, F. Calleja, A. M. Shikin, O. Vilkov, A. G. Rybkin, D. Estyunin, S. Muff, J. H. Dil, A. V. de Parga et al., *2D Mater.* **5**, 035029 (2018).
11. A. López, L. Colmenárez, M. Peralta, F. Mireles, and E. Medina, *Phys. Rev. B* **99**, 085411 (2019).
12. N. Rytova, *Moscow Univ. Phys. Bull.* **3**, 30 (1967).
13. L. Keldysh, *Sov. Phys. JETP* **29**, 658 (1979).
14. Y. Gindikin and V. A. Sablikov, *Phys. Rev. B* **98**, 115137 (2018).
15. Y. Gindikin and V. A. Sablikov, *Phys. St. Sol. RRL* **12**, 1800209 (2018).
16. Y. Gindikin, V. Vigdorichik, and V. A. Sablikov, *Phys. St. Sol. RRL* **14**, 1900600 (2020).
17. Y. Gindikin, I. V. Rozhansky, and V. A. Sablikov, arXiv:2207.12414.
18. Y. Gindikin and V. A. Sablikov, *Phys. Rev. B* **95**, 045138 (2017).
19. Y. Gindikin and V. A. Sablikov, *Physica E: Low-dim. Syst. Nanostruct.* **143**, 115328 (2022).
20. Y. Gindikin and V. A. Sablikov, *Europ. Phys. J. Spec. Top.* **229**, 503 (2020).
21. A. G. Pogosov, A. A. Shevyrin, D. A. Pokhabov, E. Y. Zhdanov, and S. Kumar, *J. Phys.: Condens. Matter* **34**, 263001 (2022).

22. F. W. J. Olver, D. W. Lozier, R. F. Boisvert, and C. W. Clark, *NIST Handbook of Mathematical Functions*, Cambridge Univ. Press, Cambridge (2010).
23. B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, *Science* **314**, 1757 (2006).
24. D. G. Rothe, R. W. Reinthaler, C.-X. Liu, L. W. Molenkamp, S.-C. Zhang, and E. M. Hankiewicz, *New J. Phys.* **12**, 065012 (2010).
25. F. Stern, *Phys. Rev. Lett.* **18**, 546 (1967).
26. J. Voit, *Rep. Progr. Phys.* **58**, 977 (1995).
27. Y. Gindikin and V. A. Sablikov, *Phys. St. Sol. RRL* **12**, 1700313 (2018).
28. Y. Gindikin, *Phys. St. Sol. RRL* **11**, 1700256 (2017).
29. O. A. Tretiakov, K. S. Tikhonov, and V. L. Pokrovsky, *Phys. Rev. B* **88**, 125143 (2013).
30. J. D. Chudow, D. F. Santavicca, and D. E. Prober, *Nano Lett.* **16**, 4909 (2016).

РАСЩЕПЛЕНИЕ ДИРАКОВСКИХ СОСТОЯНИЙ В КВАНТОВЫХ ЯМАХ HgTe. РОЛЬ КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКОЙ ОРИЕНТАЦИИ, ИНТЕРФЕЙСНОЙ, ОБЪЕМНОЙ И СТРУКТУРНОЙ АСИММЕТРИИ

*М. В. Дурнев, Г. В. Буджин, С. А. Тарасенко**

*Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской Академии наук
194021, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 6 июня 2022 г.,
после переработки 6 июня 2022 г.
Принята к публикации 26 июня 2022 г.

Развита микроскопическая теория тонкой структуры двумерных дираковских состояний в квантовых ямах HgTe/CdHgTe с кристаллографической ориентацией $(0lh)$, где l и h — индексы Миллера. Показано, что объемная, интерфейсная и структурная асимметрии приводят к антипересечению энергетических уровней даже при $\mathbf{k} = 0$ (\mathbf{k} — двумерный волновой вектор в плоскости квантовой ямы) и снимают вырождение дираковских состояний. В квантовых ямах критической толщины двукратно вырожденный дираковский конус расщепляется на невырожденные вейлевские конусы. Характер расщепления и положение вейлевских точек в пространстве волновых векторов и энергий зависят от кристаллографической ориентации ямы. Представлен расчет параметров расщепления, обусловленного интерфейсной, объемной и структурной асимметрией ямы, и выведен эффективный гамильтониан, описывающий дираковские состояния. Получено аналитическое выражение для энергетического спектра и проанализирован спектр квантовых ям с ориентациями (001) , (013) и (011) .

Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 95-летию Э. И. Рашба

DOI: 10.31857/S0044451022100133

EDN: JTVKBS

1. ВВЕДЕНИЕ

Гетероструктуры на основе соединения HgTe с инвертированной зонной структурой являются предметом активных исследований в современной физике твердого тела. В зависимости от дизайна гетероструктур, в частности от толщины слоя HgTe, в них могут быть реализованы различные фазовые состояния, в том числе фазы трехмерного и двумерного топологических изоляторов, двумерного бесщелевого полупроводника, двумерного полуметалла и др. [1, 2]. Отдельный интерес представляют квантовые ямы HgTe критической ширины — ширины, при которой происходит переход между тривиальным и топологически нетривиальным изоляторами [3, 4]. Такие структуры характеризуются бесще-

левым спектром, а носители заряда ведут себя как двумерные дираковские фермионы с линейной дисперсией.

Центросимметричные модели квантовых ям HgTe/CdHgTe предсказывают двукратное вырождение дираковского конуса и, соответственно, четырехкратное вырождение дираковской точки при $\mathbf{k} = 0$ в ямах критической ширины [3]. Здесь \mathbf{k} — волновой вектор в плоскости квантовой ямы. Объемная инверсионная асимметрия (BIA), связанная с отсутствием центра инверсии в решетке цинковой обманки, интерфейсная инверсионная асимметрия (IIA), связанная с анизотропией химических связей на интерфейсах квантовой ямы, а также структурная инверсионная асимметрия (SIA) снимают вырождение дираковских состояний [4–13]. Вклад в расщепление вносят как широко известные линейные по \mathbf{k} слагаемые Рашба [14–16] и Дрессельхауза [17–20], так и слагаемые в гамильтониане, которые снимают четырехкратное

* E-mail: tarasenko@coherent.ioffe.ru

вырождение в точке $\mathbf{k} = 0$ [4–8]. Исследования показывают, что щель при $\mathbf{k} = 0$, вызванная антипересечением уровней, достигает больших значений в квантовых ямах с кристаллографической ориентацией (001) и возникает в основном за счет смешивания состояний легких и тяжелых дырок на интерфейсах квантовой ямы [4, 12].

Многие эксперименты, однако, выполняются на структурах HgTe/CdHgTe, выращенных вдоль низкосимметричных кристаллографических направлений, таких как [013] и [012], см., например, работы [10–12, 21–23]. Выбор кристаллографического направления продиктован технологией: молекулярно-пучковая эпитаксия слоев HgTe и CdHgTe на низкосимметричных поверхностях GaAs (несогласованных по постоянной решетки) позволяет получить структуры высокого качества [24]. Технологические и экспериментальные достижения являются мотивацией для теоретических исследований низкосимметричных квантовых ям [23, 25, 26].

В данной работе построена микроскопическая теория тонкой структуры дираковских состояний в квантовых ямах HgTe/CdHgTe с учетом интерфейсной, объемной и структурной асимметрии. Показано, что энергетический спектр квантовых ям критической ширины в значительной степени зависит от кристаллографической ориентации ямы. Вычислены параметры, описывающие расщепление спектра. Исследованы квантовые ямы, выращенные на плоскостях (0lh), где l и h — индексы Миллера, и изучена эволюция тонкой структуры спектра при переходе от квантовых ям (001) к ямам (013) и (011).

2. ТОНКАЯ СТРУКТУРА ДИРАКОВСКИХ СОСТОЯНИЙ

Дираковские состояния в ямах HgTe/CdHgTe критической и близкой к критической толщины образованы из состояний $|E1, \pm 1/2\rangle$ электронного типа и состояний $|H1, \pm 3/2\rangle$ дырочного типа [27, 28]. Соответствующие базисные функции при $\mathbf{k} = 0$ имеют вид

$$\begin{aligned} |E1, +1/2\rangle &= f_1(z)|\Gamma_6, +1/2\rangle + f_4(z)|\Gamma_8, +1/2\rangle, \\ |H1, +3/2\rangle &= f_3(z)|\Gamma_8, +3/2\rangle, \\ |E1, -1/2\rangle &= f_1(z)|\Gamma_6, -1/2\rangle + f_4(z)|\Gamma_8, -1/2\rangle, \\ |H1, -3/2\rangle &= f_3(z)|\Gamma_8, -3/2\rangle, \end{aligned} \quad (1)$$

где $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ — волновой вектор в плоскости ямы, $f_j(z)$ ($j = 1, 3, 4$) — плавные огибающие, z — направление роста, $|\Gamma_6, m\rangle$ ($m = \pm 1/2$) и $|\Gamma_8, m\rangle$

($m = \pm 1/2, \pm 3/2$) — блоховские амплитуды зон Γ_6 и Γ_8 в центре зоны Бриллюэна. Мы будем рассматривать квантовые ямы (0lh) и использовать систему координат $x \parallel [100]$, $y \parallel [0h\bar{l}]$, $z \parallel [0lh]$, связанную с квантовой ямой.

Эффективный гамильтониан размерности 4×4 , описывающий смешивание базисных состояний (1) и формирование дираковского спектра, можно получить в рамках $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -теории, см. разд. 3. Учитывая объемную, структурную и интерфейсную асимметрию в ямах (0lh), мы можем представить эффективный гамильтониан в виде

$$H = H_0 + H_{IIA/BIA} + H_{SIA}, \quad (2)$$

где

$$H_0 = \begin{pmatrix} \delta & iAk_+ & 0 & 0 \\ -iAk_- & -\delta & & 0 \\ 0 & 0 & \delta & -iAk_- \\ 0 & 0 & iAk_+ & -\delta \end{pmatrix} \quad (3)$$

— линейный по \mathbf{k} гамильтониан Берневига–Хьюза–Жанга (двумерный гамильтониан Дирака) [27], A — параметр, определяющий скорость дираковских фермионов, δ — энергетический зазор между подзонами $E1$ и $H1$ в отсутствие смешивания.

Интерфейсная асимметрия, связанная с анизотропией химических связей на интерфейсах, и объемная асимметрия, вызванная отсутствием центра инверсии в кристалле, приводят к смешиванию базисных состояний. Такое смешивание в точке $\mathbf{k} = 0$ описывается гамильтонианом

$$\begin{aligned} H_{IIA/BIA} &= \\ &= \begin{pmatrix} 0 & -\eta \sin 2\theta & 0 & i\gamma \cos 2\theta \\ -\eta \sin 2\theta & 0 & i\gamma \cos 2\theta & 0 \\ 0 & -i\gamma \cos 2\theta & 0 & \eta \sin 2\theta \\ -i\gamma \cos 2\theta & 0 & \eta \sin 2\theta & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (4)$$

где η и γ — параметры смешивания, $\theta = \arctg(l/h)$ — угол между осью роста квантовой ямы [0lh] и осью [001]. Углы $\theta = 0$, $\arctg(1/3) \approx 0.321$, $\pi/4$ соответствуют направлениям [001], [013], [011].

Структурная асимметрия в ямах (0lh), выращенных из материалов с кубической решеткой, так-

же приводит к смешиванию базисных функций при $\mathbf{k} = 0$, которое описывается гамильтонианом

$$H_{SIA} = \begin{pmatrix} 0 & i\chi \sin 4\theta & 0 & \zeta \sin^2 2\theta \\ -i\chi \sin 4\theta & 0 & \zeta \sin^2 2\theta & 0 \\ 0 & \zeta \sin^2 2\theta & 0 & i\chi \sin 4\theta \\ \zeta \sin^2 2\theta & 0 & -i\chi \sin 4\theta & 0 \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Параметры смешивания χ и ζ отличны от нуля только при одновременном учете структурной асимметрии и кубической формы элементарной ячейки кристалла. Отметим также, что H_{SIA} обращается в нуль в ямах с ориентацией (001).

Параметры η , γ , χ и ζ рассчитаны в разд. 3 в рамках 6-зонной $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -модели. Для квантовых ям HgTe/Cd_{0.7}Hg_{0.3}Te критической ширины ($d_c \approx 6.7$ нм) $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -теория дает следующие оценки: $\eta, \gamma \sim 5$ мэВ и $\zeta, \chi \sim 0.1$ мэВ в электрическом поле $E_z = 15$ кВ/см.

Гамильтонианы $H_{IIA/BIA}$ (4) и H_{SIA} (5) зависят от направления роста квантовой ямы, которое задается углом θ . Диагонализация гамильтониана (2) дает четыре дисперсионных ветви с энергиями

$$E_{1,4} = \mp \sqrt{\delta^2 + \gamma_\theta^2 + \eta_\theta^2 + \zeta_\theta^2 + \chi_\theta^2 + A^2 k^2 + 2AK}, \quad (6)$$

$$E_{2,3} = \mp \sqrt{\delta^2 + \gamma_\theta^2 + \eta_\theta^2 + \zeta_\theta^2 + \chi_\theta^2 + A^2 k^2 - 2AK},$$

где $k^2 = k_x^2 + k_y^2$,

$$K = \sqrt{(\gamma_\theta^2 + \zeta_\theta^2)k^2 + (\chi_\theta k_x + \eta_\theta k_y)^2} \quad (7)$$

и

$$\begin{aligned} \gamma_\theta &= \gamma \cos 2\theta, & \eta_\theta &= \eta \sin 2\theta, \\ \zeta_\theta &= \zeta \sin^2 2\theta, & \chi_\theta &= \chi \sin 4\theta. \end{aligned} \quad (8)$$

В следующих разделах проанализирована тонкая структура дираковских состояний в квантовых ямах с различными кристаллографическими ориентациями для различных механизмов смешивания.

2.1. Интерфейсная и объемная асимметрия

Дираковские состояния в квантовых ямах HgTe/CdHgTe с симметричным гетеропотенциалом описываются гамильтонианом $H = H_0 + H_{IIA/BIA}$, где H_0 и $H_{IIA/BIA}$ даются формулами (3) и (4). Энергетический спектр, определяемый выражением (6), принимает вид

$$\begin{aligned} E_{1,4} &= \mp \sqrt{\delta^2 + \gamma_\theta^2 + \eta_\theta^2 + A^2 k^2 + 2A \sqrt{\gamma_\theta^2 k^2 + \eta_\theta^2 k_y^2}}, \\ E_{2,3} &= \mp \sqrt{\delta^2 + \gamma_\theta^2 + \eta_\theta^2 + A^2 k^2 - 2A \sqrt{\gamma_\theta^2 k^2 + \eta_\theta^2 k_y^2}}. \end{aligned} \quad (9)$$

На рис. 1 приведены энергетические спектры дираковских состояний в квантовых ямах (001), (013) и (011) критической ширины ($\delta = 0$) с учетом вклада ПА/ВИА. Ориентация (001) соответствует $\theta = 0$. В этом случае спектр имеет вид двух невырожденных (вейлевских) конусов, сдвинутых друг относительно друга по энергии [4]. Вейлевские точки расположены при $\mathbf{k} = 0$ и энергиях $E = \pm\gamma$. Ориентация (011) соответствует $\theta = \pi/4$. В таких ямах вклад ПА/ВИА расщепляет дираковский конус на два вейлевских конуса, сдвинутых друг относительно друга вдоль оси k_y . Вейлевские точки расположены в точках $\mathbf{k} = (0, \pm\eta/A)$. Спектр квантовой ямы (013) и ям произвольной ориентации ($0lh$) представляет собой промежуточный случай между спектрами структур (001) и (011). В этом случае спектр содержит четыре вейлевские точки. Две из них с нулевой энергией находятся в точках $\mathbf{k} = (0, \pm\sqrt{\gamma_\theta^2 + \eta_\theta^2}/A)$, а две других с энергиями $E = \pm\sqrt{\gamma_\theta^2 + \eta_\theta^2}$ расположены в точке $\mathbf{k} = 0$.

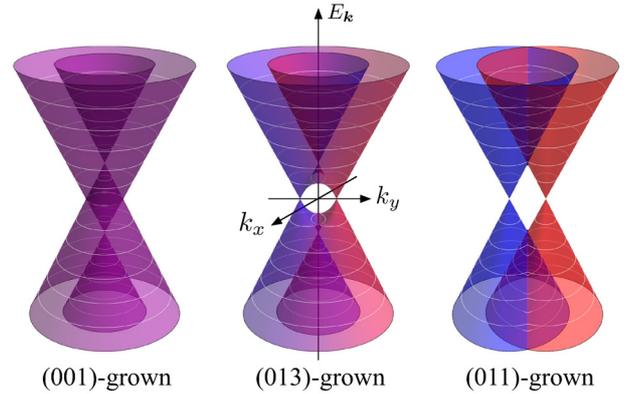


Рис. 1. (В цвете онлайн) Энергетические спектры дираковских состояний в квантовых ямах HgTe/CdHgTe кристаллографических ориентаций (001), (013) и (011) критической ширины при наличии интерфейсной и объемной асимметрии. Спектры построены по формулам (9) для $\delta = 0$ и $\gamma = \eta$. Цветом изображена проекция псевдоспина на нормаль квантовой ямы (см. подробности в тексте): синий и красный цвета соответствуют $\sigma_z = -1$ и $\sigma_z = +1$, а фиолетовый цвет — $\sigma_z = 0$

Цветом на рис. 1 изображена проекция псевдоспина σ_z на нормаль квантовой ямы. Здесь $\sigma_z = |c_1|^2 + |c_2|^2 - |c_3|^2 - |c_4|^2$, где c_j — коэффициенты разложения волновой функции ψ по базисным функциям (1). Цвет иллюстрирует относительный вклад блоков со спином «вверх» ($|E1, +1/2\rangle$ и $|H1, +3/2\rangle$) и блоков со спином «вниз» ($|E1, -1/2\rangle$ и $|H1, -3/2\rangle$) в заданное состояние ψ . В ямах (001) вейлевские конусы сформированы поровну функци-

ями со спином «вверх» и «вниз» и, следовательно, $\sigma_z = 0$ (фиолетовый цвет) для всех собственных состояний. Напротив, сдвинутые друг относительно друга конусы в ямах (011) описываются чистыми волновыми функциями со спином «вверх» и «вниз», и им соответствуют $\sigma_z = +1$ (красный цвет) и $\sigma_z = -1$ (синий цвет).

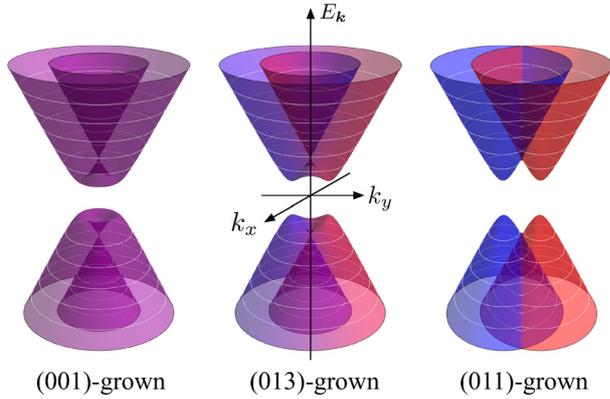


Рис. 2. (В цвете онлайн) Энергетические спектры дираковских состояний в квантовых ямах HgTe/CdHgTe кристаллографических ориентаций (001), (013) и (011) с близкой к критической шириной при наличии интерфейсной и объемной асимметрии. Спектры построены по формулам (9) для $\gamma = \eta = 2\delta$. Цветом изображена проекция псевдоспина на нормаль квантовой ямы: синий и красный цвета отвечают соответственно $\sigma_z = -1$ и $\sigma_z = +1$, а фиолетовый цвет — $\sigma_z = 0$

Энергетические спектры квантовых ям (001), (013) и (011) с шириной, близкой к критической (и щелью $2|\delta|$), показаны на рис. 2. В ямах (001) спектр имеет вид

$$E = \pm \sqrt{\delta^2 + (A|\mathbf{k}| \pm \gamma)^2}$$

и экстремумы зон расположены на окружности $|\mathbf{k}| = |\gamma/A|$. В ямах (011) энергетическая дисперсия дается выражением

$$E = \pm \sqrt{\delta^2 + A^2 k_x^2 + (A k_y \pm \eta)^2}$$

и состоит из двух подзон с проекциями псевдоспина $\sigma_z = \pm 1$. В случае произвольной ориентации вида $(0lh)$, например (013), экстремумы зон находятся в точках $\mathbf{k} = (0, \pm \sqrt{\gamma_\theta^2 + \eta_\theta^2}/A)$. Изоэнергетические контуры совпадают с сечениями тора, в частности при $|E| > \sqrt{\delta^2 + \gamma_\theta^2 + \eta_\theta^2}$ они имеют вид овалов, вытянутых вдоль оси k_y .

2.2. Структурная асимметрия

Изучим теперь влияние структурной асимметрии на энергетический спектр дираковских состояний. Для этого рассмотрим гамильтониан $H = H_0 + H_{SIA}$, где H_0 и H_{SIA} приведены в (3) и (5). Из уравнения (6) следует, что

$$E_{1,4} = \mp \sqrt{\delta^2 + \zeta_\theta^2 + \chi_\theta^2 + A^2 k^2 + 2A \sqrt{\zeta_\theta^2 k^2 + \chi_\theta^2 k_x^2}},$$

$$E_{2,3} = \mp \sqrt{\delta^2 + \zeta_\theta^2 + \chi_\theta^2 + A^2 k^2 - 2A \sqrt{\zeta_\theta^2 k^2 + \chi_\theta^2 k_x^2}}. \quad (10)$$

На рис. 3 показаны энергетические дисперсии, построенные по формулам (10), для квантовых ям (001), (013) и (011) критической ширины ($\delta = 0$). В ямах (001) структурная асимметрия не приводит к смешиванию базисных состояний при $\mathbf{k} = 0$. В результате точка $\mathbf{k} = 0$ остается четырехкратно вырожденной, так же как и в модели Берневига–Хьюза–Жанга. В ямах других ориентаций структурная асимметрия снимает четырехкратное вырождение при $\mathbf{k} = 0$ и расщепляет дираковский конус. В общем случае энергетический спектр содержит четыре вейлевские точки: две с нулевой энергией при $\mathbf{k} = (\pm \sqrt{\zeta_\theta^2 + \chi_\theta^2}/A, 0)$ и две с энергиями $E = \pm \sqrt{\zeta_\theta^2 + \chi_\theta^2}$ при $\mathbf{k} = 0$. Примечательно, что энергетическая дисперсия в ямах (011) со структурной асимметрией имеет такой же вид, как и в ямах (001) с интерфейсной и объемной асимметрией. В квантовых ямах с энергетической щелью

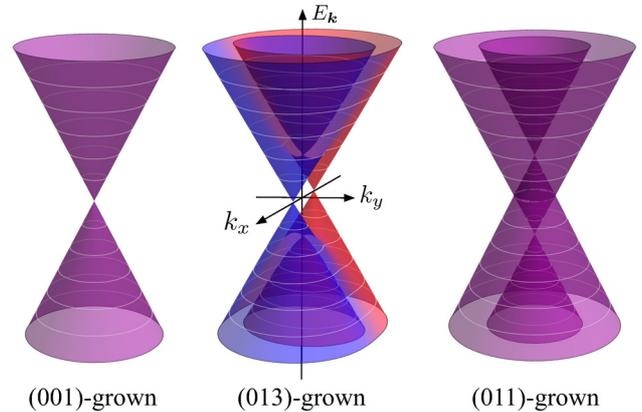


Рис. 3. (В цвете онлайн) Энергетические спектры дираковских состояний в квантовых ямах HgTe/CdHgTe кристаллографических ориентаций (001), (013) и (011) критической ширины при наличии структурной асимметрии. Спектры построены по формулам (10) для $\delta = 0$ и $\zeta = \chi$. Цветом изображена проекция псевдоспина на нормаль квантовой ямы: синий и красный цвета соответствуют $\sigma_z = -1$ и $\sigma_z = +1$, а фиолетовый цвет — $\sigma_z = 0$

лю (не показаны) экстремумы зон расположены при $\mathbf{k} = (\pm\sqrt{\zeta_\theta^2 + \chi_\theta^2}/A, 0)$, в частности, при $\mathbf{k} = 0$ в ямах (001) и на окружности $|\mathbf{k}| = |\zeta/A|$ в ямах (011).

2.3. Конкуренция между ПА/ВИА и SIA

В реальных структурах с квантовыми ямами присутствуют все типы асимметрии, включая объемную, интерфейсную и структурную. Дисперсии подзон в этом случае описываются общим уравнением (6). На рис. 4 представлены энергетические спектры дираковских состояний в асимметричных ямах, выращенных вдоль разных кристаллографических направлений.

В квантовых ямах (001) расщепление дираковского конуса в точке $\mathbf{k} = 0$ определяется слагаемым ВИА/ПА и энергетический спектр совпадает с показанным на рис. 1. Спектр асимметричной ямы (011) качественно имеет такой же вид, что и спектр симметричной ямы (013). В нем есть четыре вейлевские точки: две с нулевой энергией и волновыми векторами $\mathbf{k} = (0, \pm\sqrt{\zeta_\theta^2 + \eta_\theta^2}/A)$ и две с энергиями $E = \pm\sqrt{\zeta_\theta^2 + \eta_\theta^2}$ и $\mathbf{k} = 0$.

Спектр квантовой ямы с произвольной ориентацией (01h) и асимметричным гетеропотенциалом показан в центре на рис. 4. Две из вейлевских точек

расположены при

$$\mathbf{k} = \pm\sqrt{\frac{\gamma_\theta^2 + \eta_\theta^2 + \zeta_\theta^2 + \chi_\theta^2}{A^2(\eta_\theta^2 + \chi_\theta^2)}}(\chi_\theta, \eta_\theta). \quad (11)$$

Примечательно, что положение этих точек в \mathbf{k} -пространстве не привязанно к определенному направлению. Угол между линией, соединяющей вейлевские точки, и осью k_x , равный $\arctg(\eta_\theta/\chi_\theta)$, зависит от параметра структурной асимметрии и, следовательно, его величиной можно управлять с помощью внешнего электрического поля, направленного по нормали к квантовой яме, например напряжением на затворе.

3. 6-ЗОННАЯ $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -ТЕОРИЯ

В данном разделе представлен расчет энергетического спектра и параметров эффективного гамильтониана (2) в рамках расширенной 6-зонной $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -теории. Выбор 6-зонной модели связан с тем, что состояния зоны проводимости и валентной зоны в структурах HgTe/CdHgTe формируются главным образом из состояний зон Γ_6 и Γ_8 объемного кристалла, двукратно и четырехкратно вырожденных при $\mathbf{k} = 0$ [27–29]. С учетом $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -смешивания, деформационного взаимодействия и смешивания состояний на интерфейсах 6-зонный гамильтониан принимает вид

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{kp} + \mathcal{H}_{def} + \mathcal{H}_{int} = \begin{pmatrix} \mathcal{H}_{66} & \mathcal{H}_{68} \\ \mathcal{H}_{68}^\dagger & \mathcal{H}_{88} \end{pmatrix}, \quad (12)$$

где \mathcal{H}_{66} — матрица 2×2 в базе состояний $|\Gamma_6, +1/2\rangle, |\Gamma_6, -1/2\rangle$, \mathcal{H}_{88} — матрица 4×4 в базе состояний $|\Gamma_8, +3/2\rangle, |\Gamma_8, +1/2\rangle, |\Gamma_8, -1/2\rangle, |\Gamma_8, -3/2\rangle$, \mathcal{H}_{68} — матрица 2×4 , описывающая смешивание блоков Γ_6 и Γ_8 , \mathcal{H}_{68}^\dagger — матрица, эрмитово-сопряженная с \mathcal{H}_{68} .

Изотропная версия гамильтониана \mathcal{H}_{kp} — это стандартный 6-зонный гамильтониан Кейна, который широко используется для моделирования зонной структуры полупроводников группы III–V с узкой запрещенной зоной. Изотропная модель является упрощенной и не учитывает реальную симметрию кристаллической решетки цинковой обманки (точечная группа T_d), учет которой обязателен для описания тонкой структуры дираковских состояний. Это приводит к необходимости выхода за рамки изотропной модели Кейна и использования так называемой обобщенной модели Кейна [30], отражающей кубическую структуру и нецентросимметричность кристаллической решетки.

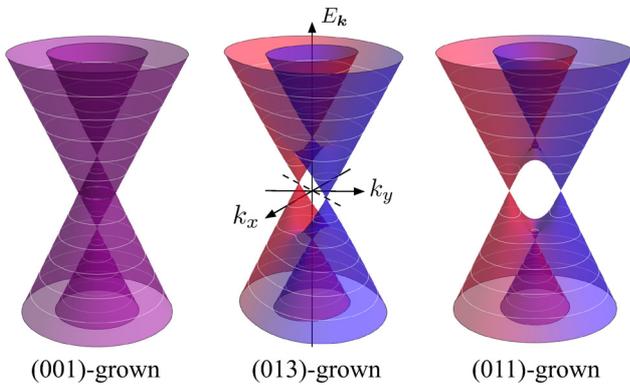


Рис. 4. (В цвете онлайн) Энергетические спектры дираковских состояний в квантовых ямах HgTe/CdHgTe кристаллографических ориентаций (001), (013) и (011) критической ширины при наличии интерфейсной, объемной и структурной асимметрии. Спектры построены по формулам (6) для $\delta = 0$ и $\gamma = \eta = \zeta = \chi$. Цветом изображена проекция псевдоспина на нормаль квантовой ямы (см. подробности в тексте): синий и красный цвета соответствуют $\sigma_z = -1$ и $\sigma_z = +1$, фиолетовый — $\sigma_z = 0$

Таблица. Параметры 6-зонного гамильтониана \mathcal{H}_{kp} , вычисленные в рамках 14-зонной $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -теории, которая включает валентные зоны Γ_7 и Γ_8 , зону проводимости Γ_6 и далекие зоны проводимости Γ'_7 и Γ'_8 [19, 32, 33]. Обозначения: E_g и E'_g — расстояния между зонами Γ_6 и Γ_8 и между зонами Γ'_7 и Γ_6 при $\mathbf{k} = 0$; Δ и Δ' — спин-орбитальные расщепления валентной зоны и далекой зоны проводимости; P , P' и Q — матричные элементы $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -смешивания зон $\Gamma_{7,8} - \Gamma_6$, $\Gamma'_{7,8} - \Gamma_6$ и $\Gamma_{7,8} - \Gamma'_{7,8}$. Предполагается, что $P' \ll P$, $\Delta' \ll E'_g$, и пренебрегается не зависящим от \mathbf{k} спин-орбитальным смешиванием зон $\Gamma_{7,8}$ и $\Gamma'_{7,8}$

m_0/m'_e	γ'_1	γ'_2	γ'_3	\varkappa_0	B_+	B_-
$2m_0P^2$	$4m_0Q^2$	m_0Q^2	m_0Q^2	0	$QP'(E_g + 2E'_g)$	$QP'\Delta'(E_g^2 + 2E_gE'_g + 2E_g'^2)$
$3\hbar^2(E_g + \Delta)$	$3\hbar^2(E_g + E'_g)$	$3\hbar^2(E_g + E'_g)$	$3\hbar^2(E_g + E'_g)$		$E'_g(E_g + E'_g)$	$2E_g'^2(E_g + E'_g)^2$

Обобщенный гамильтониан Кейна \mathcal{H}_{kp} строится методами теории представлений групп [31]. В кубических осях $x' \parallel [100]$, $y' \parallel [010]$, $z' \parallel [001]$ блоки \mathcal{H}_{66}^{kp} и \mathcal{H}_{88}^{kp} с точностью до слагаемых второго порядка по волновому вектору \mathbf{k} имеют вид

$$\mathcal{H}_{66}^{kp} = U_6 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m'_e}, \quad (13)$$

$$\mathcal{H}_{88}^{kp} = U_8 + \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[-\left(\gamma'_1 + \frac{5}{2}\gamma'_2\right)k^2 + 2\gamma'_2(\mathbf{J} \cdot \mathbf{k})^2 + 2(\gamma'_3 - \gamma'_2) \sum_{i \neq j} \{J_i J_j\}_s k_i k_j \right] + \frac{4\varkappa_0}{\sqrt{3}} \mathbf{V} \cdot \mathbf{k}, \quad (14)$$

где U_6 и U_8 — энергии зон Γ_6 и Γ_8 при $\mathbf{k} = 0$, $\mathbf{k} = (k_{x'}, k_{y'}, k_{z'})$ — волновой вектор, $\gamma'_1, \gamma'_2, \gamma'_3$ и m'_e — вклады в параметры Латтинжера и эффективную массу от далеких зон и дисперсии свободного электрона, $\mathbf{J} = (J_{x'}, J_{y'}, J_{z'})$ — вектор, составленный

из матриц углового момента $3/2$, $\mathbf{V} = (V_{x'}, V_{y'}, V_{z'})$, матрица $V_{x'}$ имеет вид $V_{x'} = \{J_{x'}, J_{y'}^2 - J_{z'}^2\}$, а матрицы $V_{y'}$ и $V_{z'}$ получаются циклической перестановкой индексов, $\{A, B\}_s = (AB + BA)/2$ — симметризованное произведение операторов A и B , \varkappa_0 — зонный параметр.

Чтобы построить матрицу \mathcal{H}_{68} , заметим, что прямое произведение представлений $\Gamma_6 \times \Gamma_8^*$ раскладывается на неприводимые представления $\Gamma_3 + \Gamma_4 + \Gamma_5$. Тройки величин $\{k_{x'}, k_{y'}, k_{z'}\}$ и $\{k_{y'}k_{z'}, k_{x'}k_{z'}, k_{x'}k_{y'}\}$ преобразуются по векторному представлению Γ_5 , а пара $\{2k_z^2 - k_x^2 - k_y^2, \sqrt{3}(k_x^2 - k_y^2)\}$ — по представлению Γ_3 . Величины, которые преобразуются по представлению Γ_4 , являются кубическими по \mathbf{k} и не учитываются. Таким образом блок \mathcal{H}_{68}^{kp} имеет вид [30]

$$\mathcal{H}_{68}^{kp\dagger} = \begin{pmatrix} \frac{i}{\sqrt{2}}(B_+k_+k_{z'} - Pk_-) & \frac{i}{3\sqrt{2}}B_-(2k_{z'}^2 - k_{\parallel}^2) \\ \sqrt{\frac{2}{3}}(iPk_{z'} + B_+k_{x'}k_{y'}) & \frac{i}{\sqrt{6}}(B_+k_+k_{z'} - Pk_-) - \frac{i}{\sqrt{6}}B_-(k_{y'}^2 - k_{x'}^2) \\ \frac{i}{\sqrt{6}}(Pk_+ + B_+k_-k_{z'}) & \sqrt{\frac{2}{3}}(iPk_{z'} + B_+k_{x'}k_{y'}) + \frac{i}{\sqrt{6}}B_-(k_{y'}^2 - k_{x'}^2) \\ \frac{i}{3\sqrt{2}}B_-(k_{\parallel}^2 - 2k_{z'}^2) & \frac{i}{\sqrt{2}}(Pk_+ + B_+k_-k_{z'}) \end{pmatrix}, \quad (15)$$

где $P = i(\hbar/m_0)p_{cv}$ — кейновский матричный элемент, B_{\pm} — зонные параметры, $k_{\pm} = k_{x'} \pm ik_{y'}$, $k_{\parallel}^2 = k_{x'}^2 + k_{y'}^2$. Заметим, что определение величин P и B_{\pm} в выражении (15) отличается множителем i от обозначений в книге [30].

Обобщенный гамильтониан Кейна, записанный в виде блоков (13)–(15), отражает реальную симметрию кристалла с решеткой цинковой обманки. Изотропное центросимметричное приближение соответствует пределу $\gamma'_2 = \gamma'_3$, $\varkappa_0 = 0$, $B_{\pm} = 0$. Отличная от нуля разность $\gamma'_2 - \gamma'_3$ связана с кубической анизотропией элементарной ячейки, а отличные от нуля параметры \varkappa_0 и B_{\pm} — с отсутствием центра пространственной инверсии. Параметр B_- описывает смешивание состояний с противоположными проекциями спина и поэтому мал по сравнению с параметром B_+ . В дальнейших расчетах параметром B_- пренебрегается.

Параметры эффективного 6-зонного гамильтониана \mathcal{H}_{kp} могут быть выражены через межзонные матричные элементы и положения зон в многозонной $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -теории. Результаты таких расчетов в рамках 14-зонной

$\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -теории [19, 32, 33], которая дополнительно к рассмотренным зонам Γ_6 и Γ_8 включает в себя валентную зону Γ_7 и далекие зоны проводимости Γ'_8 и Γ'_7 , представлены в таблице.

Эпитаксиальные слои, составляющие гетероструктуру $\text{HgTe}/\text{CdHgTe}$, обычно напряжены из-за значительного рассогласования (около 0.3%) постоянных решеток HgTe и CdTe . Гамильтониан деформационного взаимодействия \mathcal{H}_{def} строится по аналогии с $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -гамильтонианом [19, 31]. В результате такой процедуры получим диагональные блоки

$$\mathcal{H}_{66}^{def} = \Xi_c \text{Tr } \epsilon, \quad (16)$$

$$\mathcal{H}_{88}^{def} = \left(a + \frac{5}{4}b\right) \text{Tr } \epsilon - b \sum_{i,j} \{J_i J_j\}_s \epsilon_{ij} + \left(b - \frac{d}{\sqrt{3}}\right) \sum_{i \neq j} \{J_i J_j\}_s \epsilon_{ij}, \quad (17)$$

где Ξ_c — деформационный потенциал зоны Γ_6 , a , b и d — деформационные потенциалы зоны Γ_8 , \mathcal{H}_{88}^{def} — гамильтониан Бира–Пикуса, ϵ — тензор деформации, а недиагональные блоки

$$\mathcal{H}_{68}^{def} = \begin{pmatrix} -\Xi_{cv} \frac{\epsilon_{y'z'} - i\epsilon_{x'z'}}{\sqrt{2}} & i\Xi'_{cv} \frac{2\epsilon_{z'z'} - \epsilon_{x'x'} - \epsilon_{y'y'}}{3\sqrt{2}} \\ \sqrt{\frac{2}{3}} \Xi_{cv} \epsilon_{x'y'} + i\Xi'_{cv} \frac{\epsilon_{x'x'} - \epsilon_{y'y'}}{\sqrt{6}} & -\Xi_{cv} \frac{\epsilon_{y'z'} - i\epsilon_{x'z'}}{\sqrt{6}} \\ \Xi_{cv} \frac{\epsilon_{y'z'} + i\epsilon_{x'z'}}{\sqrt{6}} & \sqrt{\frac{2}{3}} \Xi_{cv} \epsilon_{x'y'} - i\Xi'_{cv} \frac{\epsilon_{x'x'} - \epsilon_{y'y'}}{\sqrt{6}} \\ i\Xi'_{cv} \frac{\epsilon_{x'x'} + \epsilon_{y'y'} - 2\epsilon_{z'z'}}{3\sqrt{2}} & \Xi_{cv} \frac{\epsilon_{y'z'} + i\epsilon_{x'z'}}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \quad (18)$$

где Ξ_{cv} и Ξ'_{cv} — межзонные деформационные потенциалы. Заметим, что Ξ_{cv} и Ξ'_{cv} обращаются в нуль в центросимметричных кристаллах. Величины Ξ_{cv} и Ξ'_{cv} для HgTe и CdTe неизвестны. Можно ожидать, что потенциал Ξ'_{cv} мал по сравнению с Ξ_{cv} , поэтому в дальнейших расчетах им пренебрегается.

Интерфейсы в гетероструктурах являются дополнительным источником смешивания блоховских состояний. В структурах с решеткой цинковой обманки интерфейсная асимметрия, обусловленная анизотропией химических связей, приводит к смешиванию состояний легких и тяжелых дырок [34, 35]. Такое смешивание состояний на интерфейсе с произвольной кристаллографической ориентацией может быть описано гамильтонианом

$$\mathcal{H}_{88}^{int} = \frac{\hbar^2 t_{l-h}}{\sqrt{3} a_0 m_0} \delta(\mathbf{r} \cdot \mathbf{n} + r_{int}) \sum_i \{J_i J_{i+1}\}_s n_{i+2}, \quad (19)$$

где t_{l-h} — безразмерный параметр смешивания, a_0 — постоянная решетки, $\mathbf{n} = (n_{x'}, n_{y'}, n_{z'})$ — единичный вектор, направленный по нормали к интерфейсу, например из слоя CdHgTe в слой HgTe , $\mathbf{r} \cdot \mathbf{n} + r_{int} = 0$ — уравнение плоскости интерфейса, r_{int} — расстояние между интерфейсом и началом координат.

Для расчета электронных и дырочных состояний в квантовых ямах с ориентацией $(0lh)$ необходимо переписать гамильтониан (12) в системе координат квантовой ямы. Переход от системы координат (x', y', z') к системе (x, y, z) соответствует в нашем случае повороту вокруг оси x на угол θ . При таком повороте базисные функции $|\Gamma_6, m\rangle$ и $|\Gamma_8, m\rangle$ преобразуются, как функции углового момента 1/2 и 3/2. Соответственно, 6-зонный гамильтониан (12) в системе координат квантовой ямы (x, y, z) принимает вид

$$\mathcal{H}_{xyz} = R^{-1} \mathcal{H} R, \quad (20)$$

где

$$R = \begin{pmatrix} R_6 & 0 \\ 0 & R_8 \end{pmatrix}, \quad (21)$$

$R_6 = \exp(is_x \theta)$ и $R_8 = \exp(iJ_x \theta)$ — матрицы вращения размерностей 2×2 и 4×4 , $s_x = \sigma_x/2$. Компоненты волнового вектора преобразуются как

$$\begin{aligned} k_{x'} &= k_x, \\ k_{y'} &= k_y \cos \theta + k_z \sin \theta, \\ k_{z'} &= k_z \cos \theta - k_y \sin \theta, \end{aligned} \quad (22)$$

а тензора деформации — как

$$\begin{aligned}
\epsilon_{x'x'} &= \epsilon_{xx}, \\
\epsilon_{x'y'} &= \epsilon_{xy} \cos \theta + \epsilon_{xz} \sin \theta, \\
\epsilon_{x'z'} &= \epsilon_{xz} \cos \theta - \epsilon_{xy} \sin \theta, \\
\epsilon_{y'y'} &= \epsilon_{yy} \cos^2 \theta + \epsilon_{zz} \sin^2 \theta + \epsilon_{yz} \sin 2\theta, \\
\epsilon_{y'z'} &= \epsilon_{yz} \cos 2\theta + (1/2)(\epsilon_{zz} - \epsilon_{yy}) \sin 2\theta, \\
\epsilon_{z'z'} &= \epsilon_{zz} \cos^2 \theta + \epsilon_{yy} \sin^2 \theta - \epsilon_{yz} \sin 2\theta.
\end{aligned} \tag{23}$$

В дальнейшем предполагаем, что деформация квантовой ямы обусловлена рассогласованием постоянной решетки a буферного слоя и постоянной решетки a_0 исходно ненапряженного материала квантовой ямы. В этом случае деформация ямы в плоскости интерфейсов определяется условием согласования решеток: $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = a/a_0 - 1$. Оставшиеся компоненты тензора деформации находятся из условий минимума упругой энергии, что приводит к следующим выражениям [21]:

$$\begin{aligned}
\epsilon_{zz} &= \frac{c_{11}^2 + 2c_{11}(c_{12} - c_{44}) + c_{12}(-3c_{12} + 10c_{44}) - (c_{11} + 3c_{12})(c_{11} - c_{12} - 2c_{44}) \cos 4\theta}{-c_{11}^2 - 6c_{11}c_{44} + c_{12}(c_{12} + 2c_{44}) + (c_{11} + c_{12})(c_{11} - c_{12} - 2c_{44}) \cos 4\theta} \epsilon_{xx}, \\
\epsilon_{yz} &= \frac{(c_{11} + 2c_{12})(c_{11} - c_{12} - 2c_{44}) \sin 4\theta}{-c_{11}^2 - 6c_{11}c_{44} + c_{12}(c_{12} + 2c_{44}) + (c_{11} + c_{12})(c_{11} - c_{12} - 2c_{44}) \cos 4\theta} \epsilon_{xx}, \\
\epsilon_{xz} &= 0, \quad \epsilon_{xy} = 0,
\end{aligned} \tag{24}$$

где c_{11} , c_{12} и c_{44} — упругие постоянные. Заметим, что $c_{11} - c_{12} - 2c_{44} = 0$ в модели изотропной упругой среды, поэтому недиагональная компонента ϵ_{yz} возникает за счет кубичности кристалла.

На рис. 5 показаны результаты численного расчета энергетического спектра квантовой ямы HgTe/Cd_{0.7}Hg_{0.3}Te критической толщины, выращенной на подложке (013). Хорошо видны расщепление дираковских состояний при $\mathbf{k} = 0$ и анизотропия спектра.

Для определения параметров эффективного гамильтониана (2) действуем следующим образом. Вначале решаем уравнение Шредингера

$$\mathcal{H}_{xyz}^{(iso)} \Psi = E \Psi$$

при $k_x = k_y = 0$, где $\mathcal{H}_{xyz}^{(iso)}$ — изотропная часть гамильтониана (20), и находим функции $|E1, \pm 1/2\rangle$ и $|H1, \pm 3/2\rangle$. Затем проецируем гамильтониан $\mathcal{H}_{xyz} - \mathcal{H}_{xyz}^{(iso)}$ на базисные состояния $|E1, \pm 1/2\rangle$ и $|H1, \pm 3/2\rangle$. В результате такой процедуры получим эффективный гамильтониан (2) с параметрами

$$A = \frac{P}{\sqrt{2}} \int f_1(z) f_3(z) dz,$$

$$\begin{aligned}
\eta &= \frac{\hbar^2 t_{l-h}}{2m_0 a_0} \left[f_3\left(\frac{w}{2}\right) f_4\left(\frac{w}{2}\right) - f_3\left(-\frac{w}{2}\right) f_4\left(-\frac{w}{2}\right) \right] + \\
&\quad + \frac{1}{\sqrt{2}} \int dz f_1(z) \Xi_{cv} \left[\epsilon_{yz} \operatorname{ctg} 2\theta + \frac{\epsilon_{zz} - \epsilon_{yy}}{2} \right] f_3(z) - \\
&\quad - \frac{1}{2\sqrt{2}} \int dz f_1(z) \partial_z B + \partial_z f_3(z), \\
\gamma &= \frac{\hbar^2 t_{l-h}}{2m_0 a_0} \left[f_3\left(\frac{w}{2}\right) f_4\left(\frac{w}{2}\right) - f_3\left(-\frac{w}{2}\right) f_4\left(-\frac{w}{2}\right) \right], \\
\chi &= \frac{\sqrt{3} \hbar^2}{4m_0} \int dz f_4(z) \partial_z (\gamma'_2 - \gamma'_3) \partial_z f_3(z) - \\
&\quad - \frac{1}{2} \int dz f_3(z) \times \\
&\quad \times \left\{ \frac{[(d + \sqrt{3}b) + (d - \sqrt{3}b) \cos 4\theta] \epsilon_{yz}}{\sin 4\theta} + \right. \\
&\quad \left. + (d - \sqrt{3}b) \frac{\epsilon_{zz} - \epsilon_{yy}}{2} \right\} f_4(z), \\
\zeta &= \frac{\sqrt{3} \hbar^2}{4m_0} \int dz f_4(z) \partial_z (\gamma'_2 - \gamma'_3) \partial_z f_3(z) + \\
&\quad + \frac{1}{2} \int dz f_3(z) (\sqrt{3}b - d) \times \\
&\quad \times \left[\epsilon_{yz} \operatorname{ctg} 2\theta + \frac{\epsilon_{zz} - \epsilon_{yy}}{2} \right] f_4(z),
\end{aligned} \tag{25}$$

где w — толщина квантовой ямы, а тензор деформации ϵ определяется выражениями (24). Заметим, что, вообще говоря, деформационные вклады в параметры η , χ и ζ зависят от угла θ . Тем не менее основная зависимость параметров тонкой структуры дираковских состояний от кристаллографи-

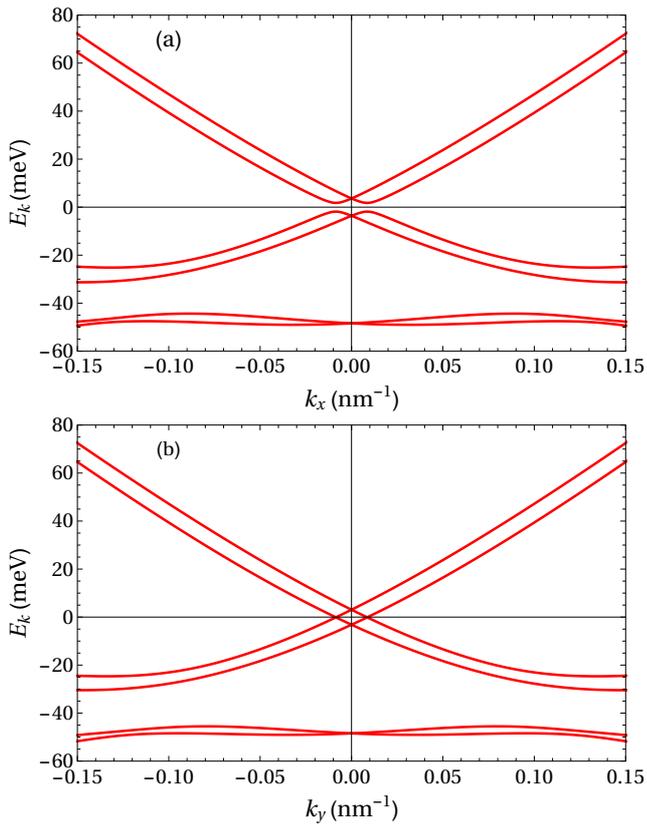


Рис. 5. Дисперсии в квантовой яме HgTe/Cd_{0.7}Hg_{0.3}Te ориентации (013) и критической толщины $d_c = 6.7$ нм для различных направлений волнового вектора в плоскости ямы: (а) $\mathbf{k} \parallel x \parallel [100]$ и (б) $\mathbf{k} \parallel y \parallel [03\bar{1}]$. Дисперсии рассчитаны численно в рамках 6-зонной $\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}$ -теории для параметров HgTe и CdTe, приведенных в работах [4, 21, 29], и электрического поля $E_z = 15$ кВ/см

ческой ориентации ямы содержится в гамильтонианах (4) и (5). Заметим также, что в структурах с симметричным потенциалом параметры χ и ζ обращаются в нуль, поскольку огибающие $f_3(z)$ и $f_4(z)$ имеют различные четности.

В заключение этого раздела приведем численные оценки параметров γ , η , ζ и χ для квантовых ям HgTe/Cd_{0.7}Hg_{0.3}Te критической толщины $w = 6.7$ нм, используя зонные параметры материалов, упругие постоянные и параметр интерфейсного смешивания из работ [4, 21, 29]. Оценки показывают, что основной вклад в γ и η порядка 5 мэВ связан с интерфейсной асимметрией (ИА) при $t_{l-h} \sim 1$. Деформационный вклад в η можно оценить как 1 мэВ для межзонной константы деформационного потенциала $\Xi_{cv} \approx -1$ эВ и компонент тензора деформации $\epsilon_{yy} = 3 \cdot 10^{-3}$, $\epsilon_{zz} = -4 \cdot 10^{-3}$, $\epsilon_{yz} = 10^{-3}$, рассчитанных с помощью выражений (24). Вклад объемной асимметрии (ВИА) в η со-

ставляет примерно 0.2 мэВ для зонного параметра $B_+ \approx 0.4\hbar^2/m_0$, величина которого оценена из таблицы для $E'_g = 4.5$ эВ [36], $Q = P$ и $P' = 0.1P$. Параметры χ и ζ связаны со структурной асимметрией (SIA) квантовой ямы. Оценки этих параметров приведем для электрического поля $E_z = 15$ кВ/см². Вклад в χ и ζ , обусловленный кубической гофрировкой спектра и определяемый разностью $\gamma'_2 - \gamma'_3$, имеет порядок 0.1 мэВ. Деформационные вклады в χ и ζ можно оценить как -0.1 мэВ и -0.2 мэВ. Параметры, связанные со структурной асимметрией, зависят от поля E_z и могут быть значительно больше в реальных структурах.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе теоретически изучена тонкая структура дираковских состояний в квантовых ямах HgTe/CdHgTe критической и близкой к критической толщины. Получен эффективный гамильтониан, описывающий с единых позиций расщепление дираковских состояний в ямах кристаллографической ориентации (01h) с учетом объемной, интерфейсной и структурной асимметрии. Эффективный гамильтониан содержит четыре параметра, ответственные за расщепление энергетического спектра при нулевом волновом векторе в плоскости квантовой ямы. Эти четыре параметра рассчитаны в рамках расширенной 6-зонной модели Кейна, учитывающей отсутствие центра инверсии и кубическую форму кристаллической решетки, упругие напряжения в квантовой яме и смешивание состояний легких и тяжелых дырок на интерфейсах квантовой ямы. Получены также аналитические выражения для энергетического спектра дираковских состояний как функции направления роста квантовой ямы и изучена эволюция спектра при переходе от ямы (001) к ямам (013) и (011). В общем случае спектр анизотропен и содержит четыре вейлевских точки в ямах критической ширины. Положения вейлевских точек зависят от кристаллографической ориентации квантовой ямы и структурной асимметрии; ими можно управлять с помощью внешнего электрического поля, направленного вдоль нормали к квантовой яме, например напряжением на затворе.

Финансирование. Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант 22-12-00211). Один из авторов (Г.В.Б.) благодарит также фонд Базис.

ЛИТЕРАТУРА

1. X.-L. Qi and S. C. Zhang, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1057 (2011).
2. З. Д. Квон, Д. А. Козлов, Е. Б. Ольшанецкий, Г. М. Гусев, Н. Н. Михайлов, С. А. Дворецкий, *УФН* **190**, 673 (2020) [*Phys.-Usp.* **63**, 629 (2020)].
3. B. Büttner, C. X. Liu, G. Tkachov, E. G. Novik, C. Brüne, H. Buhmann, E. M. Hankiewicz, P. Recher, B. Trauzettel, S. C. Zhang, and L. W. Molenkamp, *Nat. Phys.* **7**, 418 (2011).
4. S. A. Tarasenko, M. V. Durnev, M. O. Nestoklon, E. L. Ivchenko, J.-W. Luo, and A. Zunger, *Phys. Rev. B* **91**, 081302(R) (2015).
5. X. Dai, T. L. Hughes, X.-L. Qi, Z. Fang, and S. C. Zhang, *Phys. Rev. B* **77**, 125319 (2008).
6. M. König, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, T. L. Hughes, C.-X. Liu, X.-L. Qi, and S. C. Zhang, *J. Phys. Soc. Jpn.* **77**, 031007 (2008).
7. R. Winkler, L. Y. Wang, Y. H. Lin, and C. S. Chu, *Sol. St. Comm.* **152**, 2096 (2012).
8. L. Weithofer and P. Recher, *New J. Phys.* **15**, 085008 (2013).
9. M. Orlita, K. Maształerz, C. Faugeras, M. Potemski, E. G. Novik, C. Brüne, H. Buhmann, and L. W. Molenkamp, *Phys. Rev. B* **83**, 115307 (2011).
10. M. Zholudev, F. Teppe, M. Orlita, C. Consejo, J. Torres, N. Dyakonova, M. Czapkiewicz, J. Wróbel, G. Grabecki, N. Mikhailov, S. Dvoretiskii, A. Ikonnikov, K. Spirin, V. Aleshkin, V. Gavrilenko, and W. Knap, *Phys. Rev. B* **86**, 205420 (2012).
11. P. Olbrich, C. Zoth, P. Vierling, K.-M. Dantscher, G. V. Budkin, S. A. Tarasenko, V. V. Belkov, D. A. Kozlov, Z. D. Kvon, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretzky, and S. D. Ganichev, *Phys. Rev. B* **87**, 235439 (2013).
12. G. M. Minkov, A. V. Germanenko, O. E. Rut, A. A. Sherstobitov, M. O. Nestoklon, S. A. Dvoretzky, and N. N. Mikhailov, *Phys. Rev. B* **93**, 155304 (2016).
13. M. V. Durnev and S. A. Tarasenko, *Phys. Rev. B* **93**, 075434 (2016).
14. Э. И. Рашба, *ФТТ* **2**, 1224 (1960) [*Sov. Phys. Sol. St.* **2**, 1109 (1960)].
15. Ф. Т. Васько, *Письма в ЖЭТФ* **30**, 574 (1979) [*JETP Lett.* **30**, 541 (1979)].
16. Y. A. Bychkov and E. I. Rashba, *JETP Lett.* **39**, 78 (1984).
17. G. Dresselhaus, *Phys. Rev.* **100**, 580 (1955).
18. М. И. Дьяконов, В. Ю. Качоровский, *ФТП* **20**, 178 (1986) [*Sov. Phys. Semicond.* **20**, 110 (1986)].
19. Г. Е. Пикус, В. А. Марущак, А. Н. Титков, *ФТП* **22**, 185 (1988) [*Sov. Phys. Semicond.* **22**, 115 (1988)].
20. E. I. Rashba and E. Y. Sherman, *Phys. Lett. A* **129**, 175 (1988).
21. К.-М. Dantscher, D. A. Kozlov, P. Olbrich, C. Zoth, P. Faltermeier, M. Lindner, G. V. Budkin, S. A. Tarasenko, V. V. Bel'kov, Z. D. Kvon, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretzky, D. Weiss, B. Jenichen, and S. D. Ganichev, *Phys. Rev. B* **92**, 165314 (2015).
22. К.-М. Dantscher, D. A. Kozlov, M. T. Scherr, S. Gebert, J. Bärenfänger, M. V. Durnev, S. A. Tarasenko, V. V. Bel'kov, N. N. Mikhailov, S. A. Dvoretzky, Z. D. Kvon, J. Ziegler, D. Weiss, and S. D. Ganichev, *Phys. Rev. B* **95**, 201103(R) (2017).
23. G. M. Minkov, V. Ya. Aleshkin, O. E. Rut, A. A. Sherstobitov, A. V. Germanenko, S. A. Dvoretzky, and N. N. Mikhailov, *Phys. Rev. B* **96**, 035310 (2017).
24. S. Dvoretzky, N. Mikhailov, D. Ikusov, V. Kartashev, A. Kolesnikov, I. Sabinina, Y. G. Sidorov, and V. Shvets, in *Methods for Film Synthesis and Coating Procedures*, ed. by L. Nanai, IntechOpen (2020), Ch. 4.
25. O. E. Raichev, *Phys. Rev. B* **85**, 045310 (2012).
26. G. V. Budkin and S. A. Tarasenko, *Phys. Rev. B* **105**, L161301 (2022).
27. B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, *Science* **314**, 1757 (2006).
28. Л. Е. Герчиков, А. В. Субашиев, *ФТП* **23**, 2210 (1989) [*Sov. Phys. Semicond.* **23**, 1368 (1989)].
29. E. G. Novik, A. Pfeuffer-Jeschke, T. Jungwirth, V. Latussek, C. R. Becker, G. Landwehr, H. Buhmann, and L. W. Molenkamp, *Phys. Rev. B* **72**, 035321 (2005).
30. R. Winkler, *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems*, Springer-Verlag, Berlin (2003).
31. G. L. Bir and G. E. Pikus, *Symmetry and Strain-induced Effects in Semiconductors*, Wiley, New York (1974).
32. J.-M. Jancu, R. Scholz, E. A. de Andrada e Silva, and G. C. L. Rocca, *Phys. Rev. B* **72**, 193201 (2005).
33. M. V. Durnev, M. M. Glazov, and E. L. Ivchenko, *Phys. Rev. B* **89**, 075430 (2014).
34. И. Л. Алейнер, Е. Л. Ивченко, *Письма в ЖЭТФ* **55**, 662 (1992) [*JETP Lett.* **55**, 692 (1992)].
35. E. L. Ivchenko, A. Y. Kaminski, and U. Rössler, *Phys. Rev. B* **54**, 5852 (1996).
36. Z. W. Lu, D. Singh, and H. Krakauer, *Phys. Rev. B* **39**, 10154 (1989).

COLLECTIVE SPIN MODES IN FERMI LIQUIDS WITH SPIN-ORBIT COUPLING

D. L. Maslov^{a*}, *A. Kumar*^b, *S. Maiti*^c

^a *Department of Physics, University of Florida,
Gainesville, FL 32611-8440, USA*

^b *Center for Materials Theory, Department of Physics and Astronomy, Rutgers University,
Piscataway, NJ 08854, USA*

^c *Department of Physics and Centre for Research in Molecular Modeling, Concordia University,
Montreal, QC H4B 1R6, Canada*

Received July 24, 2022,
revised version July 24, 2022
Accepted July 25, 2022

Contribution for the JETP special issue in honor of E. I. Rashba's 95th birthday

DOI: 10.31857/S0044451022100145

EDN: JUCSBI

Spin-orbit coupling (SOC) plays an important and, sometimes decisive, role in many condensed matter systems, including two-dimensional (2D) electron and hole gases in semiconductor heterostructures [1,2], non-centrosymmetric normal metals [3] and superconductors [4,5], bismuth tellurohalides [6], a variety of iridates and vanadates [7], surface/edge states of three-dimensional (3D)/2D topological insulators [8–12], conducting states at oxide interfaces [13], 2D transition metal dichalcogenides (TMD) [14,15], graphene on TMD substrates [16], atomic Bose [17,18] and Fermi [19,20] gases in simulated non-Abelian magnetic fields, etc. Coupling between electron spins and momenta leads to a number of fascinating consequences, such as the electric-dipole spin resonance (EDSR) [21,22], current-induced spin polarization [23–25], persistent spin helices [26–28], quantum spin [29–31] and anomalous Hall effects [32–34], to name just a few. An interesting and still largely open question is the interplay between spin-orbit and electron-electron interactions. Such interplay gives rise to new phases of matter, e. g., topological Mott insulator [35,36], gyrotropic and multipolar orders in normal metals [37], helical Fermi liquid (FL) [38] Gor'kov–Rashba superconductor with mixed singlet-triplet order parameter [39], topological

Kondo insulators [40], etc. It also affects in a non-trivial way many physical phenomena, e. g., optical conductivity [41,42], plasmon spectra [43–45], RKKY interaction [46–48], non-analytic behavior of the spin susceptibility [49–51], etc., and gives rise to spin-dependent electron-electron interaction [52].

In this paper, we review recent progress in theoretical understanding and experimental observation of a new type of collective spin modes in 2D FLs with SOC. Such modes is perhaps the most direct manifestation of an interplay between spin-orbit and electron-electron interactions, as their existence hinges on both components being present. Unlike the conventional Silin mode in a partially spin-polarized FL [53] these modes exist even in the absence of an external magnetic field; in addition, they modify in a qualitative way the Silin mode if both SOC and magnetic field are present. As long as SOC is weak, the new modes correspond to oscillations of the magnetization which are decoupled from the oscillations of charge. The origin of the new modes can be traced to the effective spin-orbit magnetic field, which depends on the orientation and magnitude of the electron momentum, and also on the position of electron valley in the Brillouin zone (for multi-valley systems, such a graphene with proximity-induced SOC). Some of these modes have already been observed experimentally in $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$ quantum wells (in the presence of the magnetic field) [54–59], and in the surface state of a three-dimensional (3D) topological insulator (TI) Bi_2Se_3 (in zero magnetic field); [60] however, many

* E-mail: maslov@ufl.edu

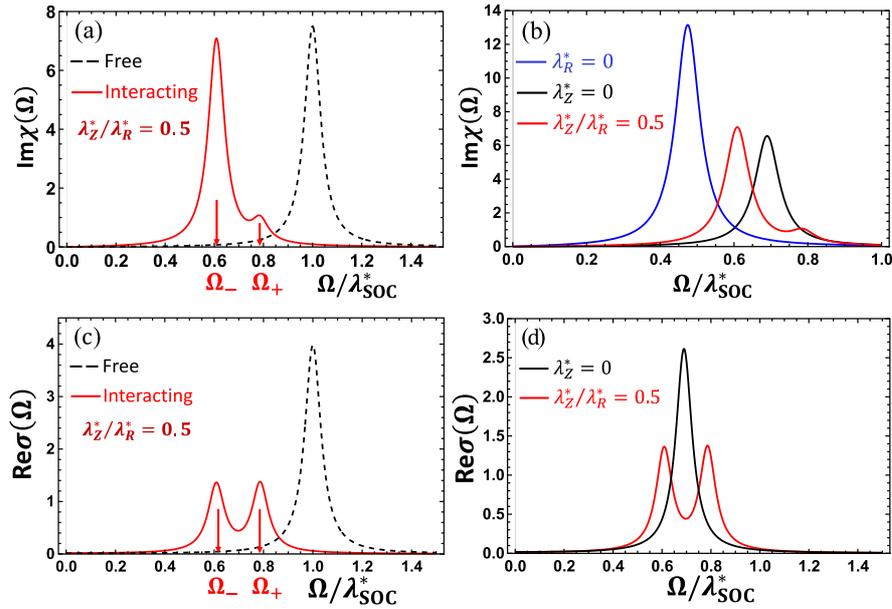


Fig. 1. Theoretical predictions for the zero-field electron spin resonance (ESR) and electric-dipole spin resonance (EDSR) in graphene with proximity-induced spin-orbit coupling (SOC). (a) ESR signal. Vertical axis: the imaginary part of the dynamical spin susceptibility. The frequency on the horizontal axis is scaled with $\lambda_{\text{SOC}}^* = \sqrt{\lambda_R^{*2} + \lambda_{\text{VZ}}^{*2}}$, where λ_R^* and λ_{VZ}^* are (renormalized) couplings of the Rashba and valley-Zeeman (VZ) types of SOC, respectively. Ω_{\pm} are the resonance frequencies, given by Eqs. (5.7a) and (5.7b) in the main text. Dashed line: non-interacting system. Red solid line: a two-valley Fermi liquid (FL) with parameters $F_0^a = -0.5500$, $F_1^a = -0.2750$, $F_2^a = -0.1375$, $H_0 = -0.5000$, $H_1 = -0.2500$, and $H_2 = -0.1250$. The ratio $\lambda_{\text{VZ}}^*/\lambda_R^* = 0.5$. The choice of FL parameters is the same for all panels of the figure. (b) ESR signal in a FL for several values of $\lambda_{\text{VZ}}^*/\lambda_R^*$, as indicated in the legend. (c) EDSR signal. Vertical axis: the real part of the optical conductivity. Dashed line: non-interacting system. Solid line: FL. (d) EDSR signal in a FL for two values of $\lambda_{\text{VZ}}^*/\lambda_R^*$, as indicated in the legend. To account for smearing of the resonances by disorder, we added a damping term, $-\delta\hat{n}(\mathbf{k}, t)/\tau_s$, to the right-hand side of the kinetic equation (2.8) in the main text. In all panels of Fig. 1, $1/\tau_s = 0.04\lambda_{\text{SOC}}^*$, where $\lambda_{\text{SOC}}^* = \sqrt{\lambda_R^{*2} + \lambda_{\text{VZ}}^{*2}}$. For $\lambda_R^* = 15.0$ meV and $\lambda_{\text{VZ}}^* = 7.5$ meV, the spin relaxation time is $1/\tau_s = 1$ ps. Reprinted with permission from Ref. [61]. Copyright 2021 by the American Physical Society

more predictions are still awaiting their experimental confirmation.

We discuss collective spin modes in three types of real-life systems: i) a 2D electron gas (2DEG) with Rashba and/or Dresselhaus SOC, ii) graphene with proximity-induced SOC, and iii) a Dirac helical state on the surface of a 3D TI. If SOC and/or magnetic field are weak, i. e., the corresponding energy scales are much smaller than the Fermi energy, collective modes in systems i) and ii) can be analyzed with the single- or two-valley versions of the Fermi-liquid (FL) theory, respectively.

The paper is organized as follows. Sec. I provides a brief introduction into the subject. In Sec. II.A, we introduce three systems considered in the rest of the paper: i) a 2D electron gas (2DEG) with Rashba and/or Dresselhaus SOC, ii) graphene with proximity-induced SOC, and iii) a Dirac helical state on the surface of a 3D TI. In Sec. II.B, we describe the single- and two-valley FL theories, which will be applied to the cases of a

2DEGs and graphene, provided that the corresponding energy scales are much smaller than the Fermi energy. In Sec. II.C, we explain why a FL theory cannot be applied to the cases of arbitrarily strong SOC and/or magnetic field. The reason is that the theory cannot be confined to a narrow interval of energies near the Fermi energy, where a quasiparticle description is applicable, but involves states far away from the Fermi surface. Sec. III serves as a short reminder of collective modes in a FL without SOC, in general, and of the Silin modes, in particular. In Sec. IV, we discuss collective spin modes in a 2DEG. Sec. IV.A describes how the FL theory is applied to the case of Rashba/Dresselhaus SOC. In Sec. IV.B, we show that the FL kinetic equation for a 2DEG with Rashba and/or Dresselhaus SOC and in the presence of the magnetic field can be mapped onto an effective tight-binding model for an artificial one-dimensional (1D) lattice, whose sites are labeled by the projections of the angular momentum. Within this mapping, the Rashba energy splitting plays a role

of the on-site energy, while the Zeeman and Dresselhaus terms describe “hopping” between the nearest and next-to-nearest neighbors. These terms form a “conduction band”, which is just the continuum of particle-hole excitations with spin-flips. The role a FL interaction is to produce “defects”, both of the on-site and bond types, and the collective modes arise as bound states due to such defects. In Sec. VI.C, we illustrate how this mapping works for the case of a 2DEG with Rashba SOC and in the presence of the magnetic field, using the s -wave approximation for the Landau function. Sec. V deals with collective spin modes in Dirac systems. In Sec. V.A we apply a two-valley version of the FL theory to graphene with proximity-induced SOC. In Sec. V.B, we derive the spectrum of inter-band spin excitations in a Dirac surface state within the ladder approximation. In Sec. VI, we discuss the spatial dispersion of collective spin modes. Sec. VII is devoted to damping due to both disorder and electron-electron interaction. In Sec. VIII, we discuss both the current and future experiment. Sec. VIII. summarizes the results of a series of Raman experiments on $\text{Cd}_{1-x}\text{Mn}_x\text{Te}$. In Sec. VIII.B, we provide a summary of recent Raman spectroscopy of a collective spin mode on the surface of Bi_2Se_3 . Sec. VIII.C contains the theoretical predictions for the electron spin resonance (ESR) and electric-dipole spin resonance (EDSR) measurements on graphene with proximity-induced SOC, both in zero and strong (compared to SOC) magnetic field. In zero field, we predict that both ESR and EDSR signals consist of two rather than one peak, provided that both Rashba and valley-Zeeman types are present, see Fig. 1. Our conclusions are given in Sec. IX.

The full text of this paper is published in the English version of JETP.

REFERENCES

1. I. Žutić, J. Fabian, and S. Das Sarma, *Rev. Mod. Phys.* **76**, 323 (2004).
2. R. Winkler, *Spin-Orbit Coupling Effects in Two-Dimensional Electron and Hole Systems* (Springer Berlin/Heidelberg, 2003).
3. K. V. Samokhin, *Ann. Phys.* **324**, 2385 (2009).
4. M. Sigrist and K. Ueda, *Rev. Mod. Phys.* **63**, 239 (1991).
5. V. P. Mineev and M. Sigrist, in *Non-Centrosymmetric Superconductors*, Lecture Notes in Physics, edited by E. Bauer and M. Sigrist (Springer Berlin / Heidelberg, 2012) pp. 129–154.
6. M. S. Bahramy, R. Arita, and N. Nagaosa, *Phys. Rev. B*, **84**, 041202 (2011).
7. W. Witczak-Krempa, G. Chen, Y. B. Kim, and L. Balents, *Annual Review of Condensed Matter Physics* **5**, 57 (2014).
8. M. Z. Hasan and C. L. Kane, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 3045 (2010).
9. M. Z. Hasan and J. E. Moore, *Annu. Rev. Condens. Matt. Phys.* **2**, 55 (2011).
10. X.-L. Qi and S.-C. Zhang, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1057 (2011).
11. J. Alicea, *Rep. Prog. Phys.* **75**, 076501 (2012).
12. J. H. Bardarson and J. E. Moore, *Rep. Prog. Phys.* **76**, 056501 (2013).
13. C. Cen, S. Thiel, J. Mannhart, and J. Levy, *Science* **323**, 1026 (2009)..
14. S. Manzeli, D. Ovchinnikov, D. Pasquier, O. V. Yazyev, and A. Kis, *Nature Reviews Materials* **2**, 17033 (2017).
15. G. Wang, A. Chernikov, M. M. Glazov, T. F. Heinz, X. Marie, T. Amand, and B. Urbaszek, *Rev. Mod. Phys.* **90**, 021001 (2018).
16. Z. Wang, D.-K. Ki, H. Chen, H. Berger, A. H. MacDonald, and A. F. Morpurgo, *Nature Communications* **6**, 8339 EP (2015).
17. Y.-J. Lin, R. L. Compton, A. R. Perry, W. D. Phillips, J. V. Porto, and I. B. Spielman, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 130401 (2009).
18. Y. J. Lin, K. Jiménez-García, and I. B. Spielman, *Nature* **471**, 83 (2011).
19. P. Wang, Z.-Q. Yu, Z. Fu, J. Miao, L. Huang, S. Chai, H. Zhai, and J. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 095301 (2012).
20. L. W. Cheuk, A. T. Sommer, Z. Hadzibabic, T. Yefsah, W. S. Bakr, and M. W. Zwierlein, *Phys. Rev. Lett.* **109**, 095302 (2012).
21. M. Schulte, J. G. S. Lok, G. Denninger, and W. Dietsche, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 137601 (2005).

22. Z. Wilamowski, W. Ungier, and W. Jantsch, *Phys. Rev. B* **78**, 174423 (2008).
23. Y. K. Kato, R. C. Myers, A. C. Gossard, and D. D. Awschalom, *Science* **306**, 1910 (2004).
24. V. Sih, R. C. Myers, Y. K. Kato, W. H. Lau, A. C. Gossard, and D. D. Awschalom, *Nat. Phys* **1**, 31 (2005).
25. J. Wunderlich, B. Kaestner, J. Sinova, and T. Jungwirth, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 047204 (2005).
26. J. Schliemann, J. C. Egues, and D. Loss, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 146801 (2003).
27. B. A. Bernevig, J. Orenstein, and S.-C. Zhang, *Exact SU(2) Phys. Rev. Lett.* **97**, 236601 (2006).
28. J. D. Koralek, C. P. Weber, J. Orenstein, B. A. Bernevig, S.-C. Zhang, S. Mack, and D. D. Awschalom, *Nature* **458**, 610 (2009).
29. B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang, *Science* **314**, 1757 (2006).
30. B. A. Bernevig and S.-C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **96**, 106802 (2006).
31. M. König, S. Wiedmann, C. Brüne, A. Roth, H. Buhmann, L. W. Molenkamp, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, *Science* **318**, 766 (2007).
32. Cui-Zu Zhang et al., *Science* **340**, 167.
33. J. G. Checkelsky, R. Yoshimi, A. Tsukazaki, K. S. Takahashi, Y. Kozuka, J. Falson, M. Kawasaki, and Y. Tokura, *Nat. Phys.* **10**, 731 (2014).
34. W. Chang, S. M. Albrecht, T. S. Jespersen, F. Kuemmeth, P. Krogstrup, J. Nygård, and C. M. Marcus, *Nature Nanotechnology* **10**, 232 EP (2015).
35. D. Pesin and L. Balents, *Nat. Phys.* **6**, 376 (2010).
36. W. Witczak-Krempa, G. Chen, Y. B. Kim, and L. Balents, regime, arXiv:1305.2193.
37. L. Fu, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 026401 (2015).
38. R. Lundgren and J. Maciejko, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 066401 (2015).
39. L. P. Gor'kov and E. I. Rashba, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 037004 (2001).
40. M. Dzero, K. Sun, V. Galitski, and P. Coleman, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 106408 (2010).
41. A.-K. Farid and E. G. Mishchenko, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 096604 (2006).
42. A. Agarwal, S. Chesi, T. Jungwirth, J. Sinova, G. Vignale, and M. Polini, *Phys. Rev. B* **83**, 115135 (2011).
43. S. M. Badalyan, A. Matos-Abiague, G. Vignale, and J. Fabian, *Phys. Rev. B* **79**, 205305 (2009).
44. S. Raghu, S. B. Chung, X.-L. Qi, and S.-C. Zhang, Collective modes of a helical liquid, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 116401 (2010).
45. S. Maiti, V. Zyuzin, and D. L. Maslov, *Phys. Rev. B* **91**, 035106 (2015).
46. P. Simon and D. Loss, *Phys. Rev. Lett.* **98**, 156401 (2007).
47. S. Chesi and D. Loss, *Phys. Rev. B* **82**, 165303 (2010).
48. S. M. Badalyan, A. Matos-Abiague, G. Vignale, and J. Fabian, *Phys. Rev. B* **81**, 205314 (2010).
49. R. A. Žak, D. L. Maslov, and D. Loss, *Phys. Rev. B* **82**, 115415 (2010).
50. R. A. Žak, D. L. Maslov, and D. Loss, *Phys. Rev. B* **85**, 115424 (2012).
51. D. Miserev, J. Klinovaja, and D. Loss, *Phys. Rev. B* **103**, 075104 (2021).
52. Y. Gindikin and V. A. Sablikov, arXiv:2206.12586 (2022).
53. V. P. Silin, *Sov. Phys. JETP* **6**, 945 (1958).
54. F. Perez, C. Aku-leh, D. Richards, B. Jusserand, L. C. Smith, D. Wolverson, and G. Karczewski, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 026403 (2007).
55. F. Baboux, F. Perez, C. A. Ullrich, I. D'Amico, G. Karczewski, and T. Wojtowicz, *Phys. Rev. B* **87**, 121303 (2013).
56. F. Baboux, F. Perez, C. A. Ullrich, G. Karczewski, and T. Wojtowicz, *Phys. Rev. B* **92**, 125307 (2015).
57. F. Perez, F. Baboux, C. A. Ullrich, I. D'Amico, G. Vignale, G. Karczewski, and T. Wojtowicz, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 137204 (2016).
58. S. Karimi, F. Baboux, F. Perez, C. A. Ullrich, G. Karczewski, and T. Wojtowicz, *Phys. Rev. B* **96**, 045301 (2017).
59. I. D'Amico, F. Perez, and C. A. Ullrich, *J. Phys. D: Applied Physics* **52**, 203001 (2019).
60. H.-H. Kung, S. Maiti, X. Wang, S.-W. Cheong, D. L. Maslov, and G. Blumberg, *Phys. Rev. Lett.* **119**, 136802 (2017).
61. A. Kumar, S. Maiti, and D. L. Maslov, *Phys. Rev. B* **104**, 155138 (2021).

ВЛИЯНИЕ ДАВЛЕНИЯ НА ЭЛЕКТРОННУЮ ЗОННУЮ СТРУКТУРУ И ЦИРКУЛЯРНЫЙ ФОТОТОК В ТЕЛЛУРЕ

*М. М. Глазов, Е. Л. Ивченко, М. О. Нестоклон**

*Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук
194021, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 06 июня 2022 г.,
после переработки 09 июня 2022 г.
Принята к публикации 09 июня 2022 г.

Развита шестизонная kr -модель для описания зонной структуры теллура. В рамках эффективного гамильтониана, а также в методе функционала плотности (DFT) проанализировано влияние гидростатической деформации на структуру зон. Определена параметризация kr -гамильтониана. В kr -методе прослежена трансформация зон при закрытии щели. Показано, что в DFT-подходе с нелокальным гибридным обменно-корреляционным функционалом на основе функционала PBE при давлениях $p \lesssim 4$ ГПа щель в спектре теллура не закрывается. Выполнен расчет спектров междузонного поглощения света и циркулярного фототока при прямых междузонных переходах в деформированном теллуре.

Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 95-летию Э. И. Рашба

DOI: 10.31857/S0044451022100157

EDN: JUDFNW

1. ВВЕДЕНИЕ

Теллур является одним из классических полупроводников, насчитывающим давнюю и богатую историю исследований. Кристаллы теллура киральные и существуют в виде двух энантиомеров с пространственными группами симметрии D_3^4 и D_3^6 в обозначениях Шенфлиса, или $P3_121$ и $P3_221$ в международной системе обозначений. Как и другие киральные вещества, теллур обладает естественной оптической активностью [1, 2] и магнитокиральной анизотропией [3], на нем впервые были обнаружены циркулярный фотогальванический эффект [4, 5] и оптическая активность, индуцированная током [6].

В последние годы изучение теллура возобновилось с новой силой. Это связано с повышенным интересом к эффектам ориентации спинов электрическим током в теллуре [7–10], фотогальваническим эффектам и эффектам увлечения электронов фотонами [11], к спиновой структуре электронных состояний в этом материале [12], а также возможно-

стью реализации так называемых вейлевских точек в зонной структуре теллура [13–15]. Изучаются также возможности создания устройств микроэлектроники на основе Te [16], а также электронная структура и оптические свойства монослоев Te [17–19].

Зонная структура теллура в значительной мере обусловлена спин-орбитальным взаимодействием [20]. В эффективном гамильтониане, описывающем состояние зоны проводимости, имеются линейные по волновому вектору электрона спин-зависимые слагаемые, наподобие членов, предсказанных Э. И. Рашба для вюрцитных кристаллов [21, 22]. Примечательно, что спин-орбитальное взаимодействие полностью снимает спиновое вырождение состояний в двух верхних валентных подзонах, причем энергетическое расстояние между ними сопоставимо с шириной запрещенной зоны.

Изучение влияния гидростатического давления на электронную зонную структуру кристаллов теллура берет начало в 1930-х годах [23], см. также [24–29]. С ростом давления кристаллическая структура теллура претерпевает ряд структурных превращений [30]. Первое из них — переход от тригональной фазы Te(I) с точечной группой симметрии D_3 к моноклинной фазе Te(II), причем при комнатной температуре переход происходит при давлении примерно $p_c = 4$ ГПа, что установлено во многих ра-

* E-mail: glazov@coherent.ioffe.ru

ботах: $p_c=3.6$ ГПа [23], 4.3 ГПа [31], 4.04 ГПа [32], 4 ГПа [33–35]; в статье [36] указано, что в исследованных образцах теллура в интервале давлений 4–4.5 ГПа фазы Te(I) и Te(II) сосуществуют. Также не оспаривается снижение ширины запрещенной зоны теллура E_g с ростом давления при $p < p_c$ [37–39]. В отличие от консенсуса относительно критического значения p_c и знака производной $\partial E_g/\partial p < 0$, нет однозначности в ответе на вопрос о том, происходит ли переход полупроводник–металл еще в тригональной фазе, т.е. при $p < p_c$, или в результате превращения Te(I) \rightarrow Te(II). Так, в экспериментальных работах [40, 41] утверждается, что с ростом давления ширина запрещенной зоны уменьшается, но остается конечной вплоть до критического значения p_c . Напротив, в двух других экспериментальных работах указано, что схлопывание запрещенной зоны в теллуре с ростом давления происходит при $p = 2$ ГПа [42] или $p = 3.5$ ГПа [43]. Согласно недавно опубликованной работе [38] ширина запрещенной зоны уменьшается от $E_g = 0.3$ эВ при $p = 0$ до 0.14 эВ при $p = 2.205$ ГПа, а асимптотическая прямая $E_g = a + bp$ при $p = 4$ ГПа принимает значение меньше 0.03 эВ. Расчеты *ab initio* показывают, что запрещенная зона схлопывается и в зоне Бриллюэна формируются вейлевские точки при $p = 1.6$ ГПа [13] или $p \approx 2.18$ ГПа [14]. Таким образом, вопрос о переходе теллура в металлическое состояние при $p < p_c$ сохраняет актуальность и предполагает дальнейшее экспериментальное и теоретическое исследование.

В настоящей работе зонная структура теллура исследуется в рамках шестизонной **кp**-модели, включающей две спиновые подзоны проводимости и четыре валентных подзоны. Ранее **кp**-анализ для недеформированного теллура проводился для четырех подзон валентной зоны [20, 44]. Кроме того, мы провели расчет зонной структуры теллура в методе функционала плотности (DFT) и сравнили его с результатами, полученными в **кp**-модели. На основе сопоставления двух подходов определена параметризация **кp**-гамильтониана, а также исследована зависимость параметров эффективного гамильтониана от гидростатического давления. В **кp**-модели главным параметром, на который влияет давление, является ширина запрещенной зоны E_g .

Мы также проанализировали роль обменно-корреляционного функционала в DFT-подходе. Для этого мы сравнили расчёты зонной структуры, выполненные с использованием модифицированного функционала Беке–Джонсона (mBJ) [45] и нелокального гибридного потенциала YSPBE0 (гибрид-

ный потенциал на основе PBE с экранировкой Юкавы [46]). Результаты, полученные с использованием потенциала mBJ, качественно повторяют результаты работы [13]. Однако этот подход сильно недооценивает ширину запрещенной зоны объемного Te без приложенного давления. Поэтому мы также выполнили расчёты зонной структуры с использованием гибридного функционала YSPBE0. Этот функционал, аналогичный функционалу HSE06 [47], считается на данный момент максимально точным для описания зонной структуры полупроводниковых материалов. К сожалению, он также обладает достаточно большой вычислительной сложностью, и до недавнего времени его реализация в основных пакетах для DFT-расчётов твёрдых тел была ограничена.

Развитая теория использована для расчета влияния давления на спектральную зависимость циркулярного фотогальванического эффекта в кристаллах теллура в рамках шестизонного **кp** подхода.

План статьи таков. В разд. 2 излагается шестизонная **кp**-модель для описания энергетического спектра теллура вблизи *H*-точек зоны Бриллюэна. Раздел 3 содержит анализ электронной дисперсии в находящемся под давлением кристалле теллура с малым значением E_g , когда применима упрощенная трехзонная модель, в которой учитываются две спиновые ветви зоны проводимости и ближайшая к ней ветвь валентной зоны. Далее в разд. 4 в рамках **кp**-подхода обсуждается закрытие щели и трансформация спектра при наличии гидростатического давления. Затем в разд. 5 приводятся расчеты спектров поглощения и циркулярного фотогальванического эффекта. Раздел 6 посвящен результатам DFT-расчетов и параметризации **кp**-гамильтониана. Основные результаты работы приведены в разд. 7.

2. ШЕСТИЗОННАЯ **кp**-МОДЕЛЬ

Напомним, что в недеформированном теллуре прямая запрещенная зона реализуется в точке *H* зоны Бриллюэна, см. рис. 1(а). Фактор-группа волнового вектора в этой точке D_3 совпадает с точечной группой симметрии кристалла.

Для расчета эволюции зонной структуры теллура с ростом давления p мы воспользуемся **кp**-методом, аналогичным модели Кейна для полупроводников A_3B_5 и A_2B_6 , см., например, [48]. В эффективном матричном гамильтониане \mathcal{H} размерности 6×6 учтено **кp** смешивание состояний

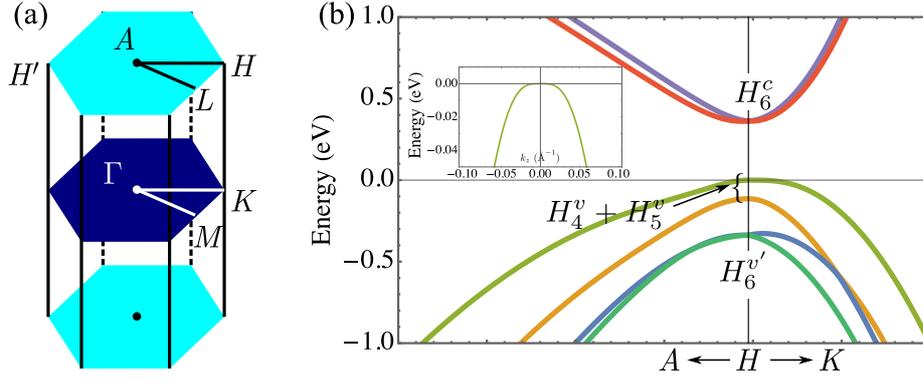


Рис. 1. (а) Зона Бриллюэна теллура в тригональной фазе. (б) Схематическая дисперсия зон при нулевом давлении в двух направлениях $H \rightarrow A$ и $H \rightarrow K$. Указаны неприводимые представления в точке H зоны Бриллюэна, по которым преобразуются соответствующие базисные функции, см. (1). На вставке к панели (б) показана дисперсия электронов в валентной зоне в увеличенном масштабе для $\mathbf{k} \parallel z$. Параметры $\mathbf{k}\mathbf{p}$ -модели приведены в табл. 1 ($p = 0$)

зоны проводимости H_6^c и валентных зон H_4^v , H_5^v и $H_6^{v'}$. Напомним, что спинорное представление H_6 группы D_3 — двумерное, а представления H_4 и H_5 — одномерные. В пренебрежении спин-орбитальным взаимодействием с далекими зонами базисные спинорные функции в вершине зоны Бриллюэна H в выделенных зонах представляют собой произведения спиновых столбцов $\alpha \equiv \uparrow$, $\beta \equiv \downarrow$ на орбитальные функции S , X и Y , рассчитанные в пренебрежении спин-орбитальным взаимодействием, а именно:

$$\begin{aligned} \text{представление } H_6^c: & \left|c, \frac{1}{2}\right\rangle = \zeta\alpha S, \\ & \left|c, -\frac{1}{2}\right\rangle = \zeta\beta S, \\ \text{представления } H_4^v + H_5^v: & \left|v, \frac{3}{2}\right\rangle = \alpha \frac{X + iY}{\sqrt{2}}, \\ & \left|v, -\frac{3}{2}\right\rangle = \beta \frac{X - iY}{\sqrt{2}}, \\ \text{представление } H_6^{v'}: & \left|v', \frac{1}{2}\right\rangle = \beta \frac{X + iY}{\sqrt{2}}, \\ & \left|v', -\frac{1}{2}\right\rangle = \alpha \frac{X - iY}{\sqrt{2}}, \end{aligned} \quad (1)$$

где ζ — фазовый множитель, выбираемый так, чтобы междузонный матричный элемент P (см. ниже) был вещественным. Несмотря на то, что функции S , X и Y преобразуются по проективным представлениям пространственных групп D_3^4 или D_3^6 , при расчете матричных элементов можно считать, что они эффективно характеризуются симметрией инварианта (S) или пары координат x, y (X и Y) (ось z направлена вдоль оси третьего порядка). Отметим, что по представлениям H_4 , H_5 преобразуются базис-

ные функции

$$\begin{aligned} |H_4^v\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left|v, \frac{3}{2}\right\rangle + \left|v, -\frac{3}{2}\right\rangle \right), \\ |H_5^v\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\left|v, \frac{3}{2}\right\rangle - \left|v, -\frac{3}{2}\right\rangle \right), \end{aligned} \quad (2)$$

но мы при записи эффективного $\mathbf{k}\mathbf{p}$ -гамильтониана будем использовать именно базисные функции $|v, 3/2\rangle$, $|v, -3/2\rangle$. Отметим, что симметрия по отношению к инверсии времени связывает две долины H и H' , рис. 1(а). При этом функции S , X , Y в долине H комплексно сопряжены с аналогичными функциями в долине H' .

Эффективный гамильтониан 6×6 представим в виде суммы основного вклада \mathcal{H} и малой поправки $\delta\mathcal{H}$. Оператор \mathcal{H} — это блочная матрица

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} H_{cc} & H_{cv} & H_{cv'} \\ H_{vc} & H_{vv} & H_{vv'} \\ H_{v'c} & H_{v'v} & H_{v'v'} \end{bmatrix} \quad (3)$$

с блоками H_{mn} ($m, n = c, v, v'$) размерности 2×2 :

$$\begin{aligned} H_{cc} &= (E_g + \varepsilon_{c\mathbf{k}})I, \\ \varepsilon_{c\mathbf{k}} &= A_c k_z^2 + B'_c k_{\perp}^2, \\ k_{\perp}^2 &= k_x^2 + k_y^2, \end{aligned} \quad (4)$$

$$H_{vv} = -(\Delta_2 + \varepsilon_{v\mathbf{k}})I + \begin{bmatrix} \beta k_z & \Delta_2 \\ \Delta_2 & -\beta k_z \end{bmatrix}, \quad (5)$$

$$\varepsilon_{v\mathbf{k}} = A k_z^2 + B' k_{\perp}^2,$$

$$H_{v'v'} = -(\Delta_1 + \Delta_2 + \varepsilon_{v\mathbf{k}})I + \begin{bmatrix} \beta k_z & 0 \\ 0 & -\beta k_z \end{bmatrix}, \quad (6)$$

$$\begin{aligned}
H_{cv} &= \begin{bmatrix} Pk_+ & 0 \\ 0 & Pk_- \end{bmatrix}, \\
H_{cv'} &= \begin{bmatrix} 0 & Pk_- \\ Pk_+ & 0 \end{bmatrix}, \\
H_{vv'} &= \begin{bmatrix} 0 & Qk_+ \\ Qk_- & 0 \end{bmatrix}.
\end{aligned} \tag{7}$$

Здесь I — единичная матрица 2×2 , Δ_1 и Δ_2 — константы спин-орбитального расщепления валентной зоны, а квадратичные по \mathbf{k} диагональные слагаемые возникают во втором порядке теории возмущений с учетом далеких зон, введены вещественные мат-

Таблица 1. Параметры \mathbf{kr} -гамильтониана, полученные путем подгонки расчетов в методе DFT

p , ГПа	0	1	2	3
E_g , эВ	0.346	0.217	0.146	0.097
Δ_2 , эВ	0.057	0.064	0.069	0.071
Δ_1 , эВ	0.278	0.267	0.253	0.253
$\Delta_{cv'}$, эВ	-0.040	—	—	—
A_c , эВ $\cdot \text{Å}^2$	62.000	62.580	78.850	94.000
$A'_{v'}$, эВ $\cdot \text{Å}^2$	-40.000	-48.000	-69.000	-74.660
A , эВ $\cdot \text{Å}^2$	35.690	53.500	72.600	80.700
B'_c , эВ $\cdot \text{Å}^2$	2.000	—	—	—
B' , эВ $\cdot \text{Å}^2$	12.480	—	—	—
$B'_{v'}$, эВ $\cdot \text{Å}^2$	-6.774	-7.000	-7.580	-12.000
P , эВ $\cdot \text{Å}$	3.309	—	—	—
Q , эВ $\cdot \text{Å}$	0.010	—	—	—
β_{\parallel}^c , эВ $\cdot \text{Å}$	0.371	0.260	0.230	0.150
β , эВ $\cdot \text{Å}$	2.000	2.000	2.320	2.350
β'_{\parallel} , эВ $\cdot \text{Å}$	1.248	—	—	—
β'_{\perp} , эВ $\cdot \text{Å}$	-0.180	-0.250	-0.400	-0.500
β'_{\perp} , эВ $\cdot \text{Å}$	-0.544	—	—	—

Примечание. Значения, которые не менялись при подгонке, приведены один раз для $p = 0$. Параметр линейного по k_z смешивания зон c и v' (гамильтониан (10)) $Q_{\parallel} = 0$; параметр, описывающий релятивистское смешивание зон v и v' в (10), $\tilde{Q} = 0$. При подгонке учитывалось различие дисперсии зон v и v' , параметры затравочной дисперсии зоны v' (представление $H_6^{v'}$) $\varepsilon_{v'\mathbf{k}} = A'_{v'}k_z^2 + B'_{v'}k_{\perp}^2$ также приведены в таблице. Величина $A'_{v'}$ близка к параметру A , описывающему зону v , а величина параметра $B'_{v'}$ слабо влияет на спектр зоны v' .

ричные элементы

$$\begin{aligned}
P &= -\frac{\hbar^2 \zeta^*}{\sqrt{2}m_0} \langle S | \frac{\partial}{\partial x} | X \rangle, \\
Q &= -i \frac{\hbar^2}{m_0} \langle X | \frac{\partial}{\partial x} | X \rangle, \\
\beta &= \frac{\hbar^2}{m_0} \text{Re} \left\{ \langle X | \frac{\partial}{\partial z} | Y \rangle \right\},
\end{aligned} \tag{8}$$

и m_0 — масса свободного электрона. Мы придерживаемся обозначения констант Δ_1 , Δ_2 , A_c , A , β согласно публикациям [20, 49]. В отличие от константы B (или B_c) в [49] константа B' (B'_c) не содержит \mathbf{kr} -вклада от нижней зоны проводимости H_6^c (от валентных подзон H_4^v , H_5^v и $H_6^{v'}$).

Поправки к гамильтониану (1) можно назвать релятивистскими, они включают линейные по \mathbf{k} члены в зонах H_6^c и $H_6^{v'}$

$$\begin{aligned}
\delta \mathcal{H}_{cc} &= \begin{bmatrix} \beta_{\parallel}^c k_z & \beta_{\perp}^c k_- \\ \beta_{\perp}^c k_+ & -\beta_{\parallel}^c k_z \end{bmatrix}, \\
\delta \mathcal{H}_{v'v'} &= \begin{bmatrix} \beta'_{\parallel} k_z & \beta'_{\perp} k_- \\ \beta'_{\perp} k_+ & -\beta'_{\parallel} k_z \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{9}$$

и междузонные вклады

$$\begin{aligned}
\delta \mathcal{H}_{cv'} &= \begin{bmatrix} \Delta_{cv} + Q_{\parallel} k_z & 0 \\ 0 & \Delta_{cv} - Q_{\parallel} k_z \end{bmatrix}, \\
\delta \mathcal{H}_{vv'} &= \begin{bmatrix} \tilde{Q} k_- & 0 \\ 0 & \tilde{Q} k_+ \end{bmatrix},
\end{aligned} \tag{10}$$

смешивающие зоны H_6^c и $H_6^{v'}$ и H_4^v , H_5^v и $H_6^{v'}$, соответственно. Гамильтониан $\mathcal{H}_{cv'}$ содержит как не зависящий от \mathbf{k} вклад спин-орбитального смешивания (Δ_{cv}), так и линейные по k_z члены ($Q_{\parallel} k_z$). Параметр $\Delta_{cv}/\sqrt{2}$ совпадает с матричным элементом оператора спин-орбитального взаимодействия $\langle H_1 | T_x | H_{31} \rangle$ из статьи [44], а параметр β_{\parallel}^c — с параметром β_c в [49]. В отличие от коэффициента β в (7) коэффициент β'_{\parallel} имеет релятивистскую малость.

Вследствие симметрии к инверсии времени параметр P и параметры, описывающие линейные по \mathbf{k} спин-зависимые вклады в дисперсию носителей заряда (β , β_{\parallel}^c и т. д.), имеют один и тот же знак в долях H и H' , а параметры Δ_2 и Q различаются знаками.

3. ЧАСТНЫЙ СЛУЧАЙ: ЗОНА ПРОВОДИМОСТИ H_6^c БЛИЗКА К ВАЛЕНТНОЙ ПОДЗОНЕ H_4^v

Пусть энергетический зазор между зоной проводимости и верхней валентной подзоной мал по срав-

нению с расстояниями до нижних валентных подзон. Такая модель адекватна для описания кристалла с малой E_g . Тогда валентные зоны H_5^v и H_6^v мож-

но исключить из рассмотрения, и в базисе $|c, 1/2\rangle$, $|c, -1/2\rangle$, $|H_4^v\rangle$ получим гамильтониан 3×3

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} E_g + \tilde{\varepsilon}_{c\mathbf{k}} + \beta_{\parallel}^c k_z & \beta_{\perp}^c k_{-} & P_{+} k_{+} \\ \beta_{\perp}^c k_{+} & E_g + \tilde{\varepsilon}_{c\mathbf{k}} - \beta_{\parallel}^c k_z & P_{-} k_{-} \\ P_{+} k_{-} & P_{-} k_{+} & -\Delta_2 - \tilde{\varepsilon}_{v\mathbf{k}} + \sqrt{\Delta_2^2 + (\beta k_z)^2} \end{bmatrix}, \quad (11)$$

где $\tilde{\varepsilon}_{c\mathbf{k}} = \Delta_{cv'}^2 / (E_g + \Delta + \Delta_2) + A_c k_z^2 + \tilde{B}'_c k_{\perp}^2$ и учтен энергетический сдвиг дна зоны проводимости за счет спин-орбитального смешивания с далекой валентной зоной, $\tilde{\varepsilon}_{v\mathbf{k}} = A k_z^2 + \tilde{B}'_v k_{\perp}^2$; \tilde{B}'_c — коэффициент, подправленный с учетом **кп**-смешивания с нижними валентными зонами H_5^v и H_6^v ; \tilde{B}'_v — коэффициент, подправленный с учетом **кп**-смешивания с нижней валентной зоной H_6^v :

$$\begin{aligned} \tilde{B}'_c &= B'_c + \frac{P^2}{2} \left(\frac{1}{E_g + 2\Delta_2} + \frac{2}{E_g + \Delta_1 + \Delta_2} \right), \\ \tilde{B}'_v &= B'_v - \frac{Q^2}{\Delta_1 + \Delta_2}, \end{aligned}$$

и перенормированные матричные элементы оператора импульса

$$P_{+} = c_{+} P, \quad P_{-} = c_{-} P$$

с учетом линейного по k_z смешивания состояний в валентной зоне, характеризуемого коэффициентами

$$c_{\pm} = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 \pm \frac{\beta k_z}{\sqrt{\Delta_2^2 + (\beta k_z)^2}} \right)}.$$

Общие выражения для энергетического спектра, описываемого гамильтонианом (11), весьма громоздки, поэтому мы остановимся на важных частных случаях. При $k_z = 0$, $\mathbf{k}_{\perp} \neq 0$ имеем

$$\mathcal{H} = \begin{bmatrix} E_g + \frac{\Delta_{cv'}^2}{E_g + \Delta + \Delta_2} + \tilde{B}'_c k_{\perp}^2 & \beta_{\perp}^c k_{-} & P k_{+} / \sqrt{2} \\ \beta_{\perp}^c k_{+} & E_g + \frac{\Delta_{cv'}^2}{E_g + \Delta + \Delta_2} + \tilde{B}'_c k_{\perp}^2 & P k_{-} / \sqrt{2} \\ P k_{-} / \sqrt{2} & P k_{+} / \sqrt{2} & -\tilde{B}'_v k_{\perp}^2 \end{bmatrix}.$$

Тогда три собственных значения энергии удовлетворяют уравнению

$$(\varepsilon_{c\mathbf{k}_{\perp}} - E) [(\varepsilon_{c\mathbf{k}_{\perp}} - E)(\varepsilon_{v\mathbf{k}_{\perp}} - E) - P^2] - \beta_{\perp}^c k_{\perp}^2 (\varepsilon_{v\mathbf{k}_{\perp}} - E) + P^2 \beta_{\perp}^2 \cos 3\varphi = 0, \quad (12)$$

где $\varepsilon_{c\mathbf{k}_{\perp}} = E_g + \Delta_{cv'}^2 / (E_g + \Delta + \Delta_2) + \tilde{B}'_c k_{\perp}^2$, $\varepsilon_{v\mathbf{k}_{\perp}} = -\tilde{B}'_v k_{\perp}^2$ и φ — угол между двумерным вектором \mathbf{k}_{\perp} и осью x . Это уравнение третьей степени при $\varphi = 0$ распадается на линейное и квадратное уравнения, решения которых имеют вид

$$\begin{aligned} E_1 &= \varepsilon_{c\mathbf{k}_{\perp}} - \beta_{\perp}^c k_x, \\ E_{2,3} &= \frac{\varepsilon_{c\mathbf{k}_{\perp}} + \beta_{\perp}^c k_x + \varepsilon_{v\mathbf{k}_{\perp}}}{2} \pm \sqrt{\left[\frac{\varepsilon_{c\mathbf{k}_{\perp}} + \beta_{\perp}^c k_x - \varepsilon_{v\mathbf{k}_{\perp}}}{2} \right]^2 + P^2 k_x^2}. \end{aligned} \quad (13)$$

Аналогичной дисперсией обладает энергетический спектр при $\varphi = 2\pi/3, 4\pi/3$. При других направлениях вектора \mathbf{k}_{\perp} простого разделения кубического уравнения (12) на линейное и квадратное не происходит, но угловая зависимость собственных энергий E_j ($j = 1, 2, 3$) сохраняет тригональную симметрию.

При $k_z \neq 0$, $\mathbf{k}_{\perp} = 0$ уравнение (12) распадается на три линейных:

$$\begin{aligned} E_{1,2} &= E_g + \frac{\Delta_{cv'}^2}{E_g + \Delta + \Delta_2} + A_c k_z^2 \pm \beta_{\parallel}^c k_z, \\ E_3 &= -\Delta_2 - A k_z^2 + \sqrt{\Delta_2^2 + (\beta k_z)^2}. \end{aligned} \quad (14)$$

На рис. 2 представлено сравнение дисперсии носителей заряда в рамках шестизонной модели (3)

и упрощенного гамильтониана (11). Расчеты производились для разных величин «затравочной» ширины запрещенной зоны, т.е. параметра E_g в эффективном гамильтониане. Видно хорошее согласие между расчетами в полной и упрощенной моделях.

4. ЗАКРЫТИЕ ЩЕЛИ В ЭЛЕКТРОННОМ СПЕКТРЕ ТЕЛЛУРА ПОД ДАВЛЕНИЕМ

Перейдем теперь к анализу эффектов, связанных с закрытием щели в теллуре под давлением. Для модельных **кр**-расчетов будем считать, что гидростатическое давление приводит к уменьшению величины E_g в эффективных гамильтонианах (3) и (11), а другие исходные параметры модели (такие как матричные элементы импульса и величины спин-орбитальных расщеплений зон) не меняются. Такое приближение позволяет по меньшей мере качественно понять суть эффекта, а результаты DFT-расчетов, представленных в разд. 6, в целом подтверждают данные выводы, хотя и ставят под сомнение возможность закрытия щели до перехода $\text{Te(I)} \rightarrow \text{Te(II)}$.

Результаты численных расчетов ширины запрещенной зоны в зависимости от затравочной величины E_g представлены на рис. 3(a). Видно, что при выбранной параметризации **кр**-гамильтониана схождение запрещенной зоны происходит при затравочной $E_g \approx -5$ мэВ. На панелях (b) и (c) рис. 3 показаны дисперсионные зависимости электрона в случаях, когда запрещенная зона схлопнулась (b) и нет (c).

Аналитически эффект можно описать в рамках упрощенной трехзонной модели для случая $\mathbf{k}_\perp = 0$. Рассмотрим для иллюстрации простейшую ситуацию, когда $|\beta k_z| \ll \Delta_2$, и пренебрежем для начала спин-орбитальным смешиванием зон. Тогда ветви 2 и 3 дисперсии пересекутся при условии

$$E_g < E_0 = \frac{(\beta_{\parallel}^c)^2}{4(A_c + A - \beta^2/2\Delta_2^2)}, \quad (15)$$

при

$$|k_{z;1,2}| = \frac{2E_0}{\beta_{\parallel}^c} \left(1 \pm \sqrt{1 - \frac{E_g^2}{E_0^2}} \right). \quad (16)$$

Здесь предполагается, что $A_c, A, \beta_{\parallel}^c > 0$. Критическое значение $E_g = E_0$, найденное по формуле (15), составляет около 1.5 мэВ, оно отмечено стрелкой на рис. 3(a). В численном расчете с используемой нами параметризацией **кр**-модели, полученной в методе DFT (см. разд. 6), однако, оказывается важнее сдвиг вверх по энергии дна зоны проводимости

за счет спин-орбитального смешивания с валентной зоной, и щель закрывается примерно при

$$E_g < E_0^\Delta = -\Delta_{cv}^2/(\Delta + \Delta_2). \quad (17)$$

В используемой параметризации $E_0^\Delta \approx -4.5$ мэВ.

Для ряда параметризаций **кр**-гамильтониана, однако, более важную роль могут играть квадратичные по k_z члены в валентной зоне. Проанализируем ответ в нулевом порядке по β_c . Для этого введем характерную энергию

$$\bar{E} = \frac{\beta^2}{2(A_c + A)}. \quad (18)$$

Касание зон осуществится при

$$k_0 = \sqrt{\frac{\bar{E}^2 - \Delta_2^2}{\beta^2}}, \quad (19)$$

причем вещественное решение возможно лишь при выполнении неравенства

$$\bar{E} = \frac{\beta^2}{2(A_c + A)} > \Delta_2. \quad (20)$$

При этом запрещенная зона схлопнется при

$$E'_0 = \frac{(\bar{E} - \Delta_2)^2}{2\bar{E}}. \quad (21)$$

Отметим, что при используемой нами параметризации условие (20) не выполнено.

5. ОПТИЧЕСКИЕ ПЕРЕХОДЫ И ЦИРКУЛЯРНЫЙ ФОТОГАЛЬВАНИЧЕСКИЙ ЭФФЕКТ

Перейдем теперь к исследованию междозонных оптических переходов и циркулярного фотогальванического эффекта в рамках шестизонной **кр**-модели. Мы ограничимся расчетами в случае, когда в спектре имеется запрещенная зона, и будем рассматривать лишь прямые междозонные переходы. Коэффициент поглощения кристалла

$$\alpha(\omega) = \frac{e^2}{\pi c n \omega} \sum_{ij} \int d^3 k |\mathbf{e} \cdot \mathbf{v}_{ij}|^2 \delta[E_i(\mathbf{k}) - E_j(\mathbf{k}) - \hbar\omega]. \quad (22)$$

Здесь ω — частота падающего излучения; напомним, что m_0 — масса свободного электрона, n — показатель преломления кристалла, \mathbf{e} — комплексный вектор поляризации света, \mathbf{v}_{ij} — матричные элементы

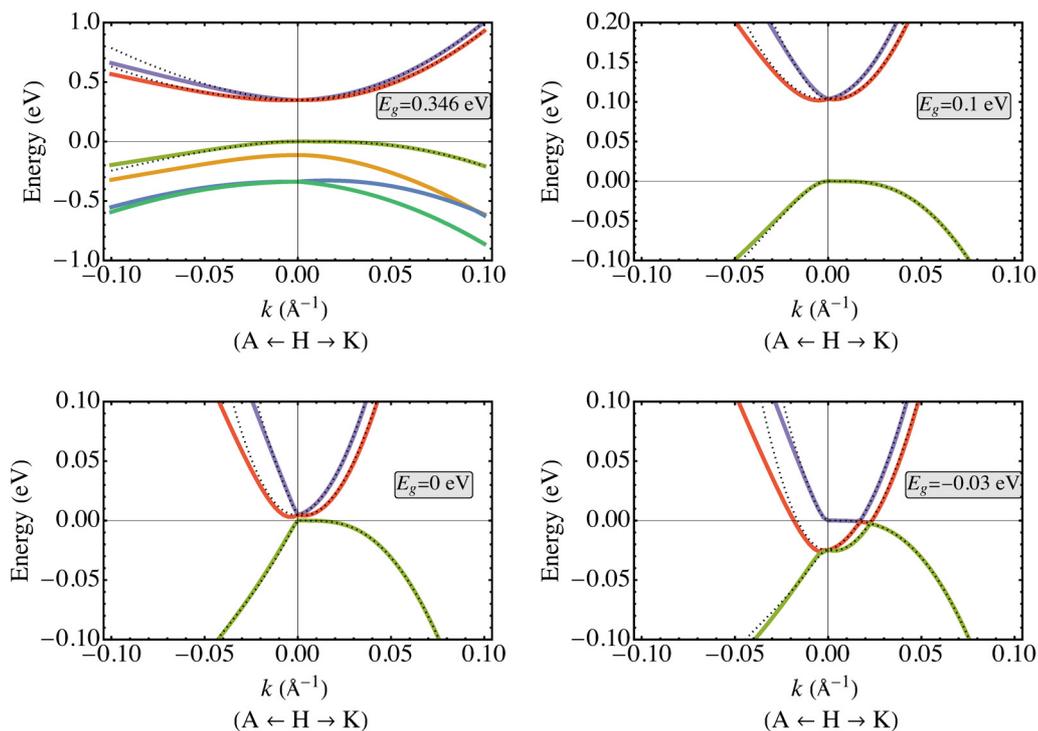


Рис. 2. Дисперсионные кривые для объемного теллура, рассчитанные при разных величинах «затравочной» ширины запрещенной зоны E_g (указаны на панелях) в рамках шестизонного кр-гамильтониана (3) (сплошные кривые) и упрощенной модели 3×3 , формула (11). Параметры кр-модели приведены в табл. 1 ($p = 0$), менялась лишь ширина запрещенной зоны

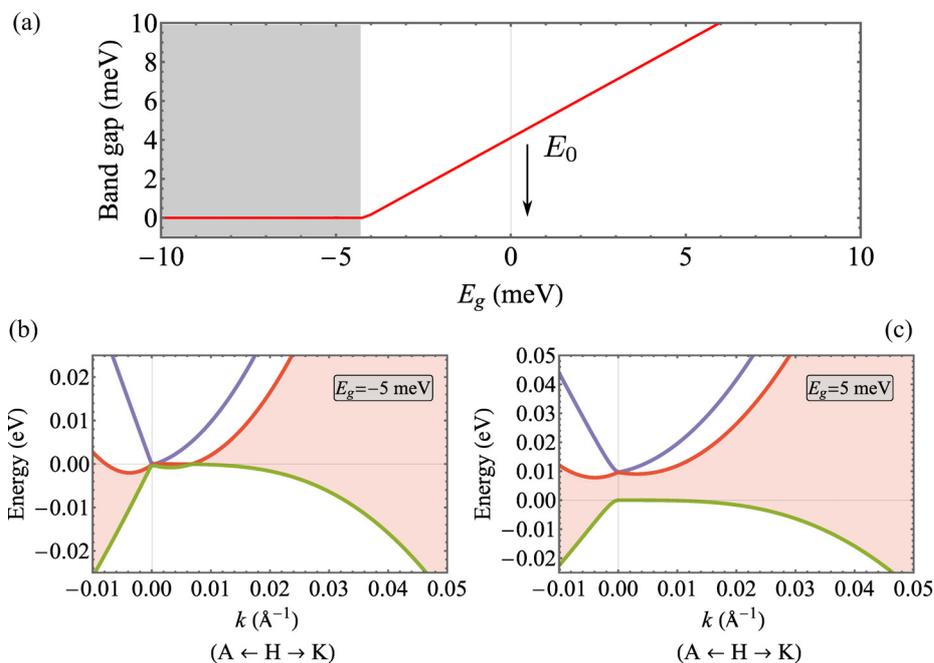


Рис. 3. (а) Зависимость ширины запрещенной зоны от параметра E_g . Стрелкой обозначена энергия E_0 , найденная по формуле (15) в рамках упрощенной модели. (b,c) Дисперсия электронов в бесщелевом случае при затравочной $E_g = -5$ мэВ (b) и в системе со щелью при $E_g = 5$ мэВ (с). Параметры расчета те же, что на рис. 2

оператора скорости $\hat{v} = \hbar^{-1} \partial \mathcal{H} / \partial \mathbf{k}$ между состояниями валентной зоны j и зоны проводимости i , $E_i(\mathbf{k})$, $E_j(\mathbf{k})$ — соответствующие дисперсии. В (22) предполагается, что кристалл не легирован.

Циркулярный фотогальванический эффект состоит в генерации постоянного электрического тока, направление которого меняется на противоположное при смене знака циркулярной поляризации, и описывается псевдотензором второго ранга $\gamma_{\alpha\beta}$, где α, β — декартовы компоненты,

$$j_{\alpha\beta} = \gamma_{\alpha\beta} \kappa_{\beta} I, \quad (23)$$

введена интенсивность света в кристалле I и вектор $\boldsymbol{\kappa} = i[\mathbf{e} \times \mathbf{e}^*] \equiv P_{circ} \mathbf{n}$, P_{circ} — степень циркулярной поляризации излучения, \mathbf{n} — единичный вектор в направлении распространения света. При распространении света вдоль главной оси возникает продольный ток, причем соответствующую компоненту тензора γ_{zz} можно представить в виде [49, 50]

$$\gamma_{zz}(\omega) = e \frac{\alpha(\omega)}{\hbar\omega} (\bar{v}_e \tau_e - \bar{v}_h \tau_h), \quad (24)$$

где τ_e и τ_h — времена релаксации по импульсу соответственно фотоэлектронов и фотодырок, а

$$\bar{v}_e \propto \sum_{ij} \int d^3k v_{ii,z} |\mathbf{e}_+ \mathbf{v}_{ij}|^2 \delta[E_i(\mathbf{k}) - E_j(\mathbf{k}) - \hbar\omega], \quad (25a)$$

$$\bar{v}_h \propto \sum_{ij} \int d^3k v_{jj,z} |\mathbf{e}_+ \mathbf{v}_{ij}|^2 \delta[E_i(\mathbf{k}) - E_j(\mathbf{k}) - \hbar\omega] \quad (25b)$$

— их средние скорости, \mathbf{e}_+ — орт правоциркулярной поляризации. В приведенных здесь и далее расчетах мы используем для нахождения матричных элементов оператора скорости и энергетического спектра шестизонный \mathbf{kp} -гамильтониан, в отличие от подхода [51, 52], где для расчета оптического отклика Те использовались волновые функции и энергии, найденные в методе DFT.

На рис. 4 представлены спектры поглощения кристалла при различных ширинах запрещенной зоны, панели (а–с), и зависимости скоростей \bar{v}_e и \bar{v}_h в (25а), (25б) от $\hbar\omega$, панели (д–ф). При $E_g = 0.346$ эВ спектр поглощения имеет характерный для объемного полупроводника вид $\propto \sqrt{\hbar\omega - E_g}$, вторая корневая особенность в спектре возникает при $\hbar\omega = E_g + 2\Delta_2$, когда начинаются оптические переходы из нижней подзоны H_5^v (отмечено стрелкой). Спектральная зависимость скоростей для

электронов \bar{v}_e и дырок \bar{v}_h различная. Для дырок при малых отстройках от края поглощения, $\hbar\omega - E_g \ll \Delta_2$, скорость линейно растет с отстройкой, а для электронов наблюдается заметная немонотонность и смена знака. Это обусловлено наличием значительных линейных по k_z членов в эффективном гамильтониане зоны проводимости в используемой нами параметризации, при этом в валентной зоне двугорбая структура выражена не очень явно (см. вставку к рис. 1). Это приводит, в частности, к $\bar{v}_e, \bar{v}_h \neq 0$ на краю поглощения; этот эффект наиболее ярко выражен для электронов и проявляется еще ярче при уменьшении ширины запрещенной зоны.

Отметим, что в кристаллах с линейной дисперсией электронов и дырок, в частности, в полуметаллах Вейля, ожидается универсальная зависимость циркулярного фототока от частоты [53]. С уменьшением E_g спектр электронов и дырок вблизи точки H в теллуре становится близким к линейному, см. рис. 2, однако эффективный гамильтониан не может быть сведен к вейлевскому гамильтониану без наклона (tilt), поэтому в нашем случае и в согласии с работами [54, 55] универсальная спектрально-независимая величина фототока не наблюдается.

Циркулярный фотогальванический эффект в недеформированном теллуре был рассчитан в рамках трехзонного \mathbf{kp} -гамильтониана в работах [49, 56]. Для того чтобы продемонстрировать связь с ранними работами [49, 50, 56], где в используемой параметризации гамильтониана линейные по \mathbf{k} члены в зоне проводимости были пренебрежимо малы, мы на рис. 5 представляем результаты расчета циркулярного фототока в такой параметризации, где $\beta_c = 0$, а β взята в 1.25 раза больше, чем значение, приведенное в табл. 1. Остальные параметры взяты, как и в расчете на рис. 4, из таб. 1 при давлении $p = 0$. Поведение кривых для \bar{v}_e, \bar{v}_h при $0 < \hbar\omega - E_g \lesssim \Delta_2$ согласуется с результатами расчета в [56].

6. ЗОННАЯ СТРУКТУРА ТЕЛЛУРА В МЕТОДЕ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

Для расчетов с помощью метода функционала плотности использовался пакет WIEN2k [57]. Для исследования релаксации решетки и упругих свойств — обменно-корреляционный функционал SCAN [58]. Для расчета электронного спектра мы брали два обменно-корреляционных функционала:

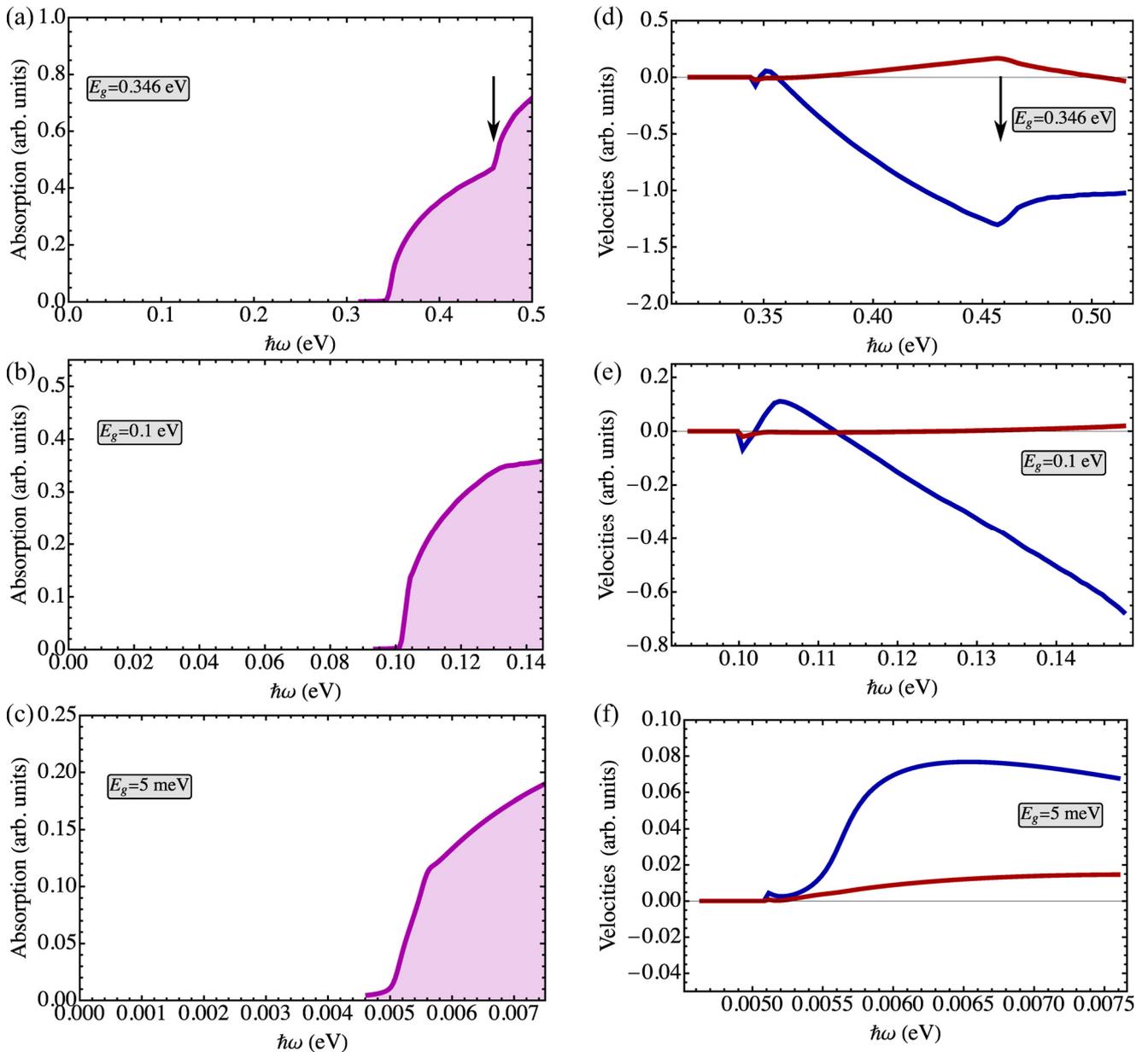


Рис. 4. (а–с) Коэффициент поглощения, обусловленный прямыми междузонными переходами и рассчитанный по золотому правилу Ферми (22) для разных ширины запрещенной зоны. Рассматривается циркулярно поляризованный свет, падающий вдоль оси третьего порядка. Параметры расчета те же, что на рис. 2. (d–f) Спектр возбуждения циркулярного фототока: зависимости скоростей \bar{v}_e (синие кривые) и \bar{v}_h (красные кривые) от энергии падающего фотона рассчитаны по формулам (25). В численных расчетах δ -функция, описывающая закон сохранения энергии, заменена на лоренциан с шириной $\Gamma = E_g/1000$, кроме панелей (с) и (f), где $\Gamma = E_g/150$. На панелях (с, f) затравочная ширина запрещенной зоны 1 мэВ. Шероховатости кривых связаны с погрешностью численного расчета

модифицированный функционал Беке–Джонсона (modified Becke–Johnson meta-GGA) [45], далее мы его называем mBJ, а также гибридный функционал на основе функционала Пердью–Берка–Эрнцгерофа (PBE) с экранировкой Юкавы (Yukawa screened PBE0 hybrid functional) [46], далее — YSPBE0.

6.1. Постоянные решетки и уравнение состояния

Обратимся сначала к основным свойствам кристаллической решетки теллура. Расчеты с параметром $R_{MT} = 2.4$ (значение по умолчанию) показывают, что значения постоянных решетки полно-

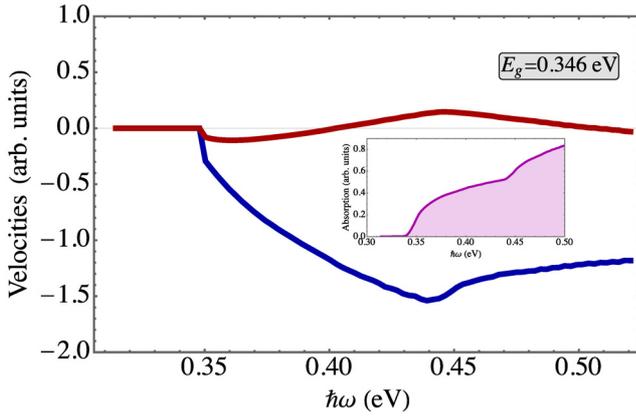


Рис. 5. Спектр возбуждения циркулярного фототока: зависимости скоростей \bar{v}_e (синие кривые) и \bar{v}_h (красные кривые) от энергии падающего фотона при $E_g = 0.346$ эВ. На вставке показан спектр поглощения. В численных расчетах δ -функция, описывающая закон сохранения энергии, заменена на лоренциан с шириной $\Gamma = E_g/1000$. Шероховатости кривых связаны с погрешностью численного расчета. Параметры расчета такие же, как и на рис. 4, но $\beta^c = 0$, $\beta = 2.5$ эВ \cdot Å

стью сходятся при следующих параметрах базиса: $R_{MT}K_{max} = 9.5$, $L_{vns} = 6$, и улучшенная с фактором 4 сетка для быстрого преобразования Фурье. В \mathbf{k} -пространстве сетка была $12 \times 12 \times 8$. При этих параметрах для Те без внешнего давления постоянные решетки составляют $a = 8.42$ ат.ед. и $c = 11.20$ ат.ед., что отличается от экспериментальных данных менее, чем на 0.1 %.

Для расчета зонной структуры при заданном давлении необходимо уравнение состояния теллура, т.е. зависимость энергии $E(V, r)$ кристалла от объема элементарной ячейки V и отношения параметров решетки $r = c/a$, а также зависимость давления от этих параметров. При заданном объеме элементарной ячейки V_i определялось равновесное отношение $r_0(V_i)$, соответствующее минимуму $E_0(V_i) = E(V_i, r_0(V_i))$, рассчитанному в DFT (отметим, что соответствующая зависимость энергии от r при фиксированном объеме хорошо описывается параболой). Получившаяся зависимость $E_0(V_i)$ подгонялась формулой Берча–Мурнагана [59, 60]

$$E(V) = E_0 + \frac{9}{16} \frac{B}{14703.6} \times V_0 [(\eta^2 - 1)^3 B' + (\eta^2 - 1)^2 \cdot (6 - 4\eta^2)], \quad (26a)$$

$$\eta = \left(\frac{V_0}{V}\right)^{1/3}$$

$$p(V) = \frac{3}{2} B(\eta^7 - \eta^5) \left(1 + \frac{3}{4} (B' - 4)(\eta^2 - 1)\right) \quad (26b)$$

и формулой Роза–Вине [61]

$$E(V) = E_0 + 2 \frac{B}{14703.6} \frac{V_0}{(B' - 1)^2} \times \left[2 - (5 + 3B'(\eta_2 - 1) - 3\eta_2) \times \exp\left(-\frac{3}{2}(B' - 1)(\eta_2 - 1)\right)\right], \quad (27a)$$

$$\eta_2 = \left(\frac{V}{V_0}\right)^{1/3}$$

$$p(V) = 3B \frac{1 - \eta_2}{\eta_2^2} \exp\left[\frac{3}{2}(B' - 1)(1 - \eta_2)\right]. \quad (27b)$$

В этих формулах давление задается в ГПа, а энергии — в Ry. Из подгонки $E(V)$, приведенной на рис. 6(a), были определены параметры $V_0 = 688.44$ ат.ед., $B = 17.26$ ГПа, $B' = 8.6$ (для уравнения Берча–Мурнагана) и $V_0 = 688.31$ ат.ед., $B = 17.15$ ГПа, $B' = 8.79$ (для уравнения Роза–Вине). На вставке приведено отношение $r = c/a$ в зависимости от объема элементарной ячейки и результат подгонки линейной зависимостью $r_0(V) = 1.401 - 0.00104(V - 620)$. Это позволяет рассчитывать $p(V)$, т.е. связать гидростатическое давление с параметрами элементарной ячейки.

Уравнения состояния позволяют рассчитать давление в зависимости от объема элементарной ячейки; обращая соответствующую зависимость, мы нашли V и c/a для теллура в зависимости от давления, рис. 6(b). Разные уравнения состояния дают совпадающие (в пределах численной погрешности) зависимости энергии от объема элементарной ячейки и давления от объема элементарной ячейки. Полученные результаты неплохо соответствуют данным эксперимента [62].

Мы также выполнили соответствующие расчеты с использованием функционала PBE, они приводят к несколько другим параметрам: $V_0 = 709.32$ ат.ед., $B = 17.78$ ГПа, $B' = 9.80$ для уравнения состояния Берча–Мурнагана и $V_0 = 709.38$ ат.ед., $B = 17.58$ ГПа, $B' = 9.74$ для уравнения состояния Роза–Вине. Таким образом, PBE существенно преувеличивает значение постоянной решетки по сравнению с экспериментальными значениями.

Интересно отметить, что при изменении давления постоянная решетки c (вдоль оси третьего порядка) практически не меняется, а постоянная решетки a меняется примерно на 4 % при давлении 2 ГПа. При этом, поскольку атомы Те в решетке формируют своего рода спирали (правовинтовые для пространственной группы D_3^4), то с увеличением давления уменьшается как расстояние

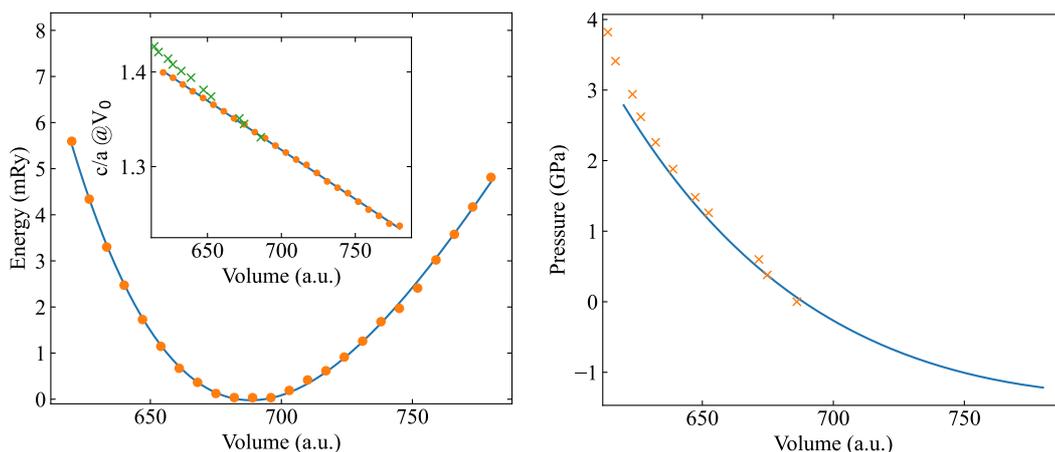


Рис. 6. (а) Рассчитанная энергия основного состояния $E_0(V_i) - E_0(V_0)$ в зависимости от объема элементарной ячейки (точки) и подгонка по формулам (26) (кривая). На вставке приведено отношение $c_0(V)/a_0(V)$ (точки), линейная аппроксимация (сплошная линия) и экспериментальные данные из работы [62] (зеленые крестики). (б) Связь между давлением и объемом элементарной ячейки определяется формулой (26b) (кривая). Кресты — экспериментальные данные из работы [62]

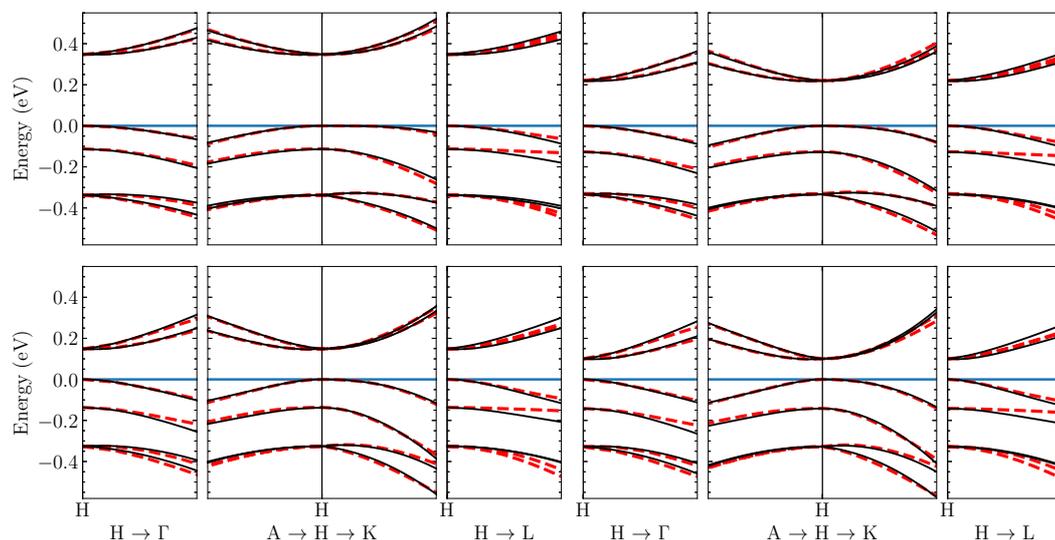


Рис. 7. Зонная структура Te при давлениях $p = 0$ ГПа (верхняя левая панель), $p = 1$ ГПа (верхняя правая панель), $p = 2$ ГПа (нижняя левая панель), $p = 3$ ГПа (нижняя правая панель). Красные штриховые кривые — расчет по методу DFT, черные сплошные кривые — кр-модель с параметрами из табл. 1. На рисунке показана окрестность точки H в различных направлениях. Диапазон изменения длины волнового вектора, отсчитанного от точки H , составляет 0.05 \AA^{-1}

между спиралями (описываемое постоянной решетки a), так и расстояние между атомами в спирали. В табл. 2 приведены значения параметров решетки для некоторых давлений.

6.2. Электронный спектр и параметры кр-модели

Расчет зонной структуры Te проводился с использованием нелокального гибридного функцио-

нала YSPBE0 [46]. Использовались следующие параметры метода DFT: $R_{MT} = 2.4$, $R_{MT}K_{max} = 8.0$, $L_{vns} = 10$, сетка в обратном пространстве $12 \times 12 \times 8$. Для расчета спин-орбитальных эффектов использовались параметры по умолчанию, кроме $E_{max} = 7.0$ [57]. Для данных параметров расчет зонной структуры хорошо сходится. На рис. 7 представлены результаты DFT-расчета зонной структуры при давлениях $p = 0, 1$ ГПа, 2 ГПа и 3 ГПа (красные штриховые линии) и их подгонка

Таблица 2. Параметры решетки Те a , c в зависимости от гидростатического давления

p , ГПа	a , а. е.	c , а. е.
0.0	4.4579	5.9275
1.0	4.3521	5.9311
1.5	4.3122	5.9306
2.0	4.2776	5.9294
2.5	4.2469	5.9277
3.0	4.2194	5.9256

в **кp**-методе (черные сплошные линии). Параметры **кp**-модели, полученные путем подгонки, приведены в табл. 1.

Отметим, что как и ожидается из общих соображений, наиболее сильная зависимость от гидростатического давления наблюдается у ширины запрещенной зоны E_g . С разумной точностью зависимость E_g от постоянной решетки a может быть описана линейной функцией

$$E_g \approx 0.346 + 0.548(a - 4.4579). \quad (28)$$

Квадратичный вклад мал, его величина близка к ошибке численного расчета.

Подчеркнем, что при всех давлениях, используемых в расчете, запрещенная зона не закрывается при постоянной $a \approx 3.8265$ ат. ед., что соответствует нереалистично большому давлению $p \gg 4$ ГПа.

Мы также выполнили расчеты с обменно-корреляционным потенциалом mBJ (аналогичные расчетам в работе [13]). Такой расчет дает ширину запрещенной зоны примерно на 50 % меньше, чем расчет с функционалом YSPBE0, при этом щель схлопывается при давлении около 2.5 ГПа. Этот результат, однако, гораздо хуже согласуется с экспериментальными данными по ширине запрещенной зоны недеформированного Те, и мы не использовали его результаты в нашем анализе.

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе построена зонная теория теллура при наличии гидростатического давления. В рамках метода эффективного гамильтониана предложена шестизонная **кp**-модель зонной структуры, включающей две спиновые подзоны проводимости и четыре валентных подзоны. Основным параметром, на который влияет давление — ширина запрещенной

зоны. В рамках предложенной **кp**-модели исследовано изменение спектра кристалла при наличии гидростатического давления, рассчитаны спектры поглощения и циркулярный фотогальванический эффект в деформированном теллуре.

Также в рамках метода функционала плотности определены параметры кристаллической решетки теллура, уравнение состояния и энергетический спектр. Выполнена параметризация **кp**-гамильтониана. Показано, что в DFT-подходе с гибридным обменно-корреляционным функционалом YSPBE0 при давлениях $p \lesssim 4$ ГПа щель в спектре теллура не закрывается.

Фининсирование. Работа поддержана Российским научным фондом (грант № 19-12-00051).

ЛИТЕРАТУРА

1. K. C. Nomura, Phys. Rev. Lett. **5**, 500 (1960).
2. Л. С. Дубинская, И. И. Фарбштейн, ФТТ **20**, 753 (1978).
3. G. L. J. A. Rikken and N. Avarvari, Phys. Rev. B **99**, 245153 (2019).
4. В. М. Аснин, А. А. Бакун, А. М. Данишевский, Е. Л. Ивченко, Г. Е. Пикус, А. А. Рогачев, Письма в ЖЭТФ **28**, 80 (1978).
5. V. M. Asnin, A. A. Bakun, A. M. Danishevskii, E. L. Ivchenko, G. E. Pikus, and A. A. Rogachev, Sol. Such that. Commun. **30**, 565 (1979).
6. Л. Е. Воробьев, Е. Л. Ивченко, Г. Е. Пикус, И. И. Фарбштейн, В. А. Шалыгин, А. И. Штурбин, Письма в ЖЭТФ **29**, 485 (1979).
7. В. А. Шалыгин, А. Н. Софронов, Л. Е. Воробьев, И. И. Фарбштейн, ФТТ **54**, 2045 (2012).
8. Tetsuya Furukawa, Yuri Shimokawa, Kaya Kobayashi, and Tetsuaki Itou, Nature Communications **8**, 954 (2017).
9. Tetsuya Furukawa, Yuta Watanabe, Naoki Ogasawara, Kaya Kobayashi, and Tetsuaki Itou, Phys. Rev. Research **3**, 023111 (2021).
10. C. Şahin, J. Rou, J. Ma, and D. A. Pesin, Phys. Rev. B **97**, 205206 (2018).
11. V. A. Shalygin, M. D. Moldavskaya, S. N. Danilov, I. I. Farbshtein, and L. E. Golub, Phys. Rev. B **93**, 045207 (2016).

12. M. Sakano, M. Hirayama, T. Takahashi, S. Akebi, M. Nakayama, K. Kuroda, K. Taguchi, T. Yoshikawa, K. Miyamoto, T. Okuda, K. Ono, H. Kumigashira, T. Ideue, Y. Iwasa, N. Mitsuiishi, K. Ishizaka, S. Shin, T. Miyake, S. Murakami, T. Sasagawa, and T. Kondo, *Phys. Rev. Lett.* **124**, 136404 (2020).
13. L. A. Agapito, N. Kioussis, W. A. Goddard III, and N.P. Ong, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 176401 (2013).
14. M. Hirayama, R. Okugawa, S. Ishibashi, S. Murakami, and T. Miyake, *Phys. Rev. Lett.* **114**, 206401 (2015).
15. K. Nakayama, M. Kuno, K. Yamauchi, S. Souma, K. Sugawara, T. Oguchi, T. Sato, and T. Takahashi, *Phys. Rev. B* **95**, 125204 (2017).
16. Yifei Yang, Mingkun Xu, Shujing Jia, Bolun Wang, Lujie Xu, Xinxin Wang, Huan Liu, Yuanshuang Liu, Yuzheng Guo, Lidan Wang, Shukai Duan, Kai Liu, Min Zhu, Jing Pei, Wenrui Duan, Dameng Liu, and Huanglong Li, *Nature Commun.* **12**, 6081 (2021).
17. Zhili Zhu, Xiaolin Cai, Seho Yi, Jinglei Chen, Yawei Dai, Chunyao Niu, Zhengxiao Guo, Maohai Xie, Feng Liu, Jun-Hyung Cho, Yu Jia, and Zhenyu Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **119**, 106101 (2017).
18. GangQiu, Yixiu Wang, Yifan Nie, Yongping Zheng, Kyeongjae Cho, Wenzhuo Wu, and Peide D. Ye, *Nano Lett.* **18**, 5760 (2018).
19. Jinjin Wang, Yanrong Guo, Hong Shen, Yu-Yo Chen, Rongjun Zhang, Yuxiang Zheng, Liangyao Chen, Songyou Wang, Yu Jia, Hong-Yi Chen, and Wan-Sheng Su, *RSC Adv.* **9**, 41703 (2019).
20. М. С. Бреслер, В. Г. Веселаго, Ю. В. Косичкин, Г. Е. Пикус, И. И. Фарбштейн, С. С. Шальт, *ЖЭТФ* **57**, 1479 (1969).
21. Э. И. Рашба, *ФТТ* **1** 407 (1959).
22. Э. И. Рашба, В. И. Шека, *ФТТ (сборник статей II)*, 162 (1959).
23. P. W. Bridgman, *Polymorphism*, *Phys. Rev.* **48**, 893 (1935).
24. Th. Starkloff and J. D. Joannopoulos, *J. Chem. Phys.* **68**, 579 (1978).
25. U. Steigenberger, M. I. Eremets, S. G. Lapin, M. von Ortenberg, A. M. Shirokov, and Y. V. Kosichkin, *J. Phys. C: Solid State Phys.* **17** 427 (1984).
26. A. Coker, T. Lee, and T.P. Das, *Phys. Rev. B* **22**, 2968 (1980).
27. Y. Ohmasa, I. Yamamoto, M. Yao and H. Endo, *J. Phys. Soc. Jpn* **64**, 4766 (1995).
28. I. Yamamoto, Y. Ohmasa, H. Ikeda, and H. Endo, *J. Phys.: Condens. Matter* **7**, 4299 (1995).
29. C. Hejny and M. I. McMahon, *Phys. Rev. B* **70**, 184109 (2004).
30. V. V. Braznkin, R. N. Voloshin, S. V. Popova, and A. G. Umnov, *J. Phys.: Condens. Matter* **4**, 141 (1992).
31. F. A. Blum and B. C. Deaton, *Phys. Rev. A* **137**, 1410 (1965).
32. S. N. Vaidya and G. C. Kennedy, *J. Phys. Chem. Solids* **33**, 1377 (1972).
33. G. Parthasarathy and W. B. Holzapfel, *Phys. Rev. B* **37**, 8499 (1988).
34. A. K. Bandyopadhyay and D. B. Singh, *Pramana — J. Phys.* **52**, 303 (1999).
35. C. Hejny and M. I. McMahon, *Phys. Rev. Lett.* **91**, 215502 (2003).
36. C. Marini, D. Chermisi, M. Lavagnini, D. Di Castro, C. Petrillo, L. Degiorgi, S. Scandolo, and P. Postorino, *Phys. Rev. B* **86**, 064103 (2012).
37. A. Koma, T. Tani, and S. Tanaka, *Phys. Stat. Solidi (b)* **66**, 669 (1974).
38. J. F. Oliveira, M. B. Fontes, M. Moutinho, S. E. Rowley, E. Baggio-Saitovitch, M. B. Silva Neto, and C. Enderlein, *Commun. Mater.* **2**, 1 (2021).
39. V. B. Anzin, M. I. Eremets, Yu. V. Kosichkin, A. I. Nadezhdinskii, and A. M. Shirokov, *Phys. Stat. Solidi (b)* **42**, 385 (1977).
40. В. В. Щенников, *ФТТ* **42**, 626 (2000).
41. K. Akiba, K. Kobayashi, T. C. Kobayashi, R. Kozuka, A. Miyake, J. Gouchi, Y. Uwatoko, and M. Tokunaga, *Phys. Rev. B* **101**, 245111 (2020).
42. T. Ideue, M. Hirayama, H. Taiko, T. Takahashi, M. Murase, T. Miyake, S. Murakami, T. Sasagawa, and Y. Iwasa, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **116**, 25530 (2019).
43. D. Rodriguez, A. A. Tsirlin, T. Biesner, T. Ueno, T. Takahashi, K. Kobayashi, M. Dressel, and E. Uykur, *Phys. Rev. B* **101**, 174104 (2020).
44. T. Doi, K. Nakao, and H. Kamimura, *J. Phys. Soc. Jpn* **28**, 36 (1970).
45. F. Tran and P. Blaha, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 226401 (2009).

46. F. Tran and P. Blaha, *Phys. Rev. B* **83**, 235118 (2011).
47. J. Heyd and G. E. Scuseria, *J. Chem. Phys.* **118**, 8207 (2003); Erratum *J. Chem. Phys.* **124**, 219906 (2006).
48. E. L. Ivchenko, *Optical Spectroscopy of Semiconductor Nanostructures*, Alpha Science Int., Harrow, UK (2005), Sect. 2.1.3.
49. Е. Л. Ивченко, Г. Е. Пикус, *Письма в ЖЭТФ* **27**, 640 (1978).
50. Н. С. Аверкиев, В. М. Аснин, А. А. Бакун, А. М. Данишевский, Е. Л. Ивченко, Г. Е. Пикус, А. А. Рогачев, *ФТП* **18**, 639 (1984).
51. S. S. Tsirkin, P. A. Puente, and I. Souza, *Phys. Rev. B* **97**, 035158 (2018).
52. S.C. Liebscher, M. K. Hagen, J. Hader, J. V. Moloney, and S. W. Koch, *Phys. Rev. B* **104**, 165201 (2021).
53. F. de Juan, A. G. Grushin, T. Morimoto, and J. E. Moore, *Nature Commun.* **8**, 15995 (2017).
54. Л. Е. Голуб, Е. Л. Ивченко, Б. З. Спивак, *Письма в ЖЭТФ* **105**, 744 (2017).
55. Н. В. Лепшенен, Е. Л. Ивченко, Л. Е. Голуб, *ЖЭТФ* **156**, 167 (2019).
56. Е. Л. Ивченко, Г. Е. Пикус, Ф в сб. *Проблемы современной физики* под ред. В. М. Тучкевича и В. Я. Френкеля, Наука, Москва (1980).
57. P. Blaha, K. Schwarz, F. Tran, R. Laskowski, G. K. H. Madsen, and L. D. Marks, *J. Chem. Phys.* **152**, 074101 (2020).
58. J. Sun, A. Ruzsinszky, and J. P. Perdew, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 036402 (2015).
59. F. Birch, *Phys. Rev.* **71**, 809 (1947).
60. F. D. Murnaghan, *Proceed. Nat. Acad. Sci.* **30**, 244 (1944).
61. P. Vinet, J. R. Smith, J. Ferrante, and J. H. Rose, *Phys. Rev. B* **35**, 1945 (1987).
62. R. Keller, W. B. Holzapfel, and H. Schulz, *Phys. Rev. B* **16**, 4404 (1977).

БИЕНИЯ ОСЦИЛЛЯЦИЙ ШУБНИКОВА – ДЕ ГААЗА В ДВУМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМАХ СО СНЯТЫМ СПИНОВЫМ ВЫРОЖДЕНИЕМ

С. И. Дорожкин*

Институт физики твердого тела Российской академии наук
142432, Черноголовка, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 14 июня 2022 г.,
после переработки 14 июня 2022 г.
Принята к публикации 16 июня 2022 г.

Рассмотрены методы, применяющиеся для обработки результатов по биению осцилляций Шубникова – де Гааза в двумерных электронных системах со снятым спиновым вырождением. Предложен критерий возникновения узлов биений в системах с нелинейной зависимостью энергии уровней Ландау от магнитного поля, и на его основании получена формула, описывающая положения узлов в двумерных электронных системах со спектром Бычкова – Рашба. Формула была использована для интерпретации первых наблюдений биений, выполненных в дырочных каналах кремниевых полевых транзисторов. Установлено, что эта формула хорошо описывает экспериментальные данные, полученные для электронов в квантовых ямах InGaAs, что является свидетельством доминирования в этих образцах спинового расщепления, обусловленного асимметрией потенциальной ямы (механизм Бычкова – Рашба). Получены свидетельства того, что в квантовых ямах InAs вклад в спиновое расщепление дает также отсутствие центра инверсии в объемном материале (механизм Дрессельхауза). Показано, что широко применяемый метод обработки данных по биению осцилляций, базирующийся на использовании преобразования Фурье, в случае двумерных электронных систем со спектром Бычкова – Рашба не позволяет получить правильные значения параметра спин-орбитального взаимодействия.

Статья для специального выпуска ЖЭТФ, посвященного 95-летию Э. И. Рашбы

DOI: 10.31857/S0044451022100169

EDN: JULDYN

1. ВВЕДЕНИЕ

В 1984 году Бычков и Рашба опубликовали работы [1, 2], в которых для описания спин-орбитального взаимодействия в двумерных электронных системах (ДЭС), формируемых в асимметричных квантовых ямах, был предложен гамильтониан, допускающий точное решение, в том числе и в квантующем магнитном поле, перпендикулярном плоскости системы. Соответствующие формулы для энергетического спектра имеют вид [1, 2]

$$\epsilon^\pm(\mathbf{k}) = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m^* \pm \alpha |\mathbf{k}| \quad (\mathbf{H} = 0), \quad (1)$$

$$\begin{aligned} \epsilon_n^\pm &= \hbar \omega_c \left(n \pm \sqrt{\delta^2 + \gamma^2 n} \right) \quad (n = 1, 2, \dots), \\ \epsilon_0 &= \hbar \omega_c \delta. \end{aligned} \quad (2)$$

Здесь α — параметр, характеризующий величину спин-орбитального взаимодействия в ДЭС, \mathbf{k} — волновой вектор двумерных электронов, m^* — эффективная масса, $\omega_c = |e|H/m^*c$ — циклотронная частота электронов в магнитном поле H , $\gamma^2 = 2\alpha^2 m^* / \hbar^3 \omega_c$,

$$\delta = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{gm^*}{2m} \right) = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{g\mu_B H}{\hbar \omega_c} \right), \quad (3)$$

g — g -фактор электрона, m — масса свободного электрона, μ_B — магнетон Бора. Уровень ϵ_0 естественным образом попадает либо в серию уровней ϵ_n^+ при $\delta > 0$, либо в серию ϵ_n^- при $\delta < 0$. В этом спектре спиновое расщепление в нулевом поле пропорционально волновому вектору состояния, а энергия уровней в квантующем магнитном поле нелинейно зависит от величины поля. Такой спектр теперь широко известен как спектр Бычкова – Рашба (БР), а предложенный гамильтониан

* E-mail: dorozh@issp.ac.ru

широко используется для расчетов различных эффектов в ДЭС со спин-орбитальным взаимодействием. Этот результат привлек внимание к возможности [3] управлять спиновой поляризацией электронов в немагнитных полупроводниках при помощи затворного напряжения в полевых транзисторах, что привело к появлению целого направления исследований в спинтронике.

Во многих случаях спиновое расщепление в ДЭС невелико по сравнению с энергией Ферми, что приводит к возникновению в нулевом магнитном поле двух близких поверхностей Ферми (контуров в двумерном случае). Тогда при квазиклассическом рассмотрении можно ожидать появления двух близких значений частот квантовых осцилляций в магнитном поле и их биений. Такие биения очень чувствительны к величине спинового расщепления и, как будет показано ниже, позволяют измерять его величину.

В данной работе сформулирован квантовый качественный критерий возникновения узла биений осцилляций Шубникова – де Гааза (ШдГ), применимый к ДЭС с нелинейной зависимостью уровней магнитного квантования от величины поля и основанный на соотношении между различными щелями в спектре. На основании этого критерия была получена [4] формула для положения узлов биений в ДЭС со спектром БР, позже подтвержденная последовательным теоретическим анализом [5, 6]. На примере биений осцилляций ШдГ в дырочных каналах кремниевых полевых транзисторов продемонстрирован механизм работы предложенного критерия. Проанализированы экспериментальные данные ряда наиболее цитируемых работ по биению осцилляций в квантовых ямах InGaAs и полевых транзисторах с электронными каналами в таких ямах. Показано, что они хорошо описываются полученной формулой. Уточнены данные по зависимости параметра спин-орбитального взаимодействия от плотности электронов в полевых транзисторах. Получено свидетельство того, что спиновое расщепление в квантовых ямах InAs является результатом как асимметрии квантовой ямы, так и отсутствия центра инверсии в объемном материале (механизм Дрессельхауза). Выполнен анализ широко используемого метода обработки данных по биению осцилляций ШдГ в ДЭС с использованием преобразования Фурье, и продемонстрирована необоснованность его применения к системам со спектром БР.

2. ФОРМУЛА ДЛЯ УЗЛОВ БИЕНИЙ КВАНТОВЫХ ОСЦИЛЛЯЦИЙ В ДЭС СО СПЕКТРОМ БЫЧКОВА – РАШБА

Как хорошо известно, квантование энергетического спектра электронов в магнитном поле приводит к магнитоосцилляциям различных величин, как термодинамических, так и кинетических (например, осцилляции де Гааза – ван Альфена магнитного момента и осцилляции ШдГ компонент тензоров магнитосопротивления и магнитопроводимости). Считается хорошо установленным, что в ДЭС осцилляции кинетических коэффициентов отражают осцилляции термодинамической плотности состояний $D = dn_s/d\mu$, совпадающей в случае невзаимодействующих электронов при нулевой температуре с плотностью одноэлектронных состояний на уровне Ферми. Здесь n_s – плотность двумерных носителей заряда, а μ – величина их химического потенциала. В ДЭС минимумы термодинамической плотности состояний соответствуют заполнению целого числа j спиновых подуровней, и их положение по магнитному полю H описывается формулой

$$n_s = jN_0,$$

где $N_0 = |e|H/hc$ – вырожденность одного подуровня, а j – целое число. В случае разрешенных подуровней $j = 1, 2, 3, \dots$, т.е. минимумы плотности состояний существуют при всех целочисленных значениях факторов заполнения $\nu = n_s/N_0$. Более распространенным, однако, является случай существенного уширения уровней за счет флуктуаций случайного потенциала, который и будет рассматриваться ниже. В случае периодической системы уровней их уширение, однако, сохранит минимумы плотности состояний между всеми уровнями и периодичность магнитоосцилляций не изменится. В ДЭС со спектром Ландау,

$$\epsilon_n^{(L)\pm} = \hbar\omega_c \left(n - \frac{1}{2} \right) \pm g\mu_B \frac{H}{2},$$

энергетические щели различны по величине, и зачастую в осцилляциях ШдГ проявляются только большие из них. В результате, в зависимости от соотношения между циклотронным и зеемановским расщеплениями, минимумы осцилляций наблюдаются при четных или нечетных значениях j факторов заполнения, что выглядит как группировка уровней в пары. В случае более сложного энергетического спектра с нелинейной зависимостью энергии уровней от магнитного поля при изменении поля может происходить изменение характера «спариваемых» уровней, сопровождающееся изменением

четности факторов заполнения в минимумах осцилляций. В осцилляционной картине такое изменение выглядит как изменение фазы осцилляций на π , т. е. возникновение узла осцилляций.

При монотонном изменении энергии уровней в зависимости от магнитного поля нетрудно написать условие изменения четности фактора заполнения в минимумах как равенство энергетических расщеплений Δ_j , в которых оказывается уровень Ферми при изменении фактора заполнения j на единицу (и, соответственно, изменении четности этого фактора). Применительно к спектру (2) это условие записывается в виде

$$\Delta_{2n+p+1} \equiv \epsilon_{n+p+1}^- - \epsilon_n^+ = \epsilon_n^+ - \epsilon_{n+p}^- \equiv \Delta_{2n+p}. \quad (4)$$

Здесь $p = 0, 1, 2, \dots$. Разность энергий в левой (правой) части уравнения вычисляется в магнитном поле $H_{2n+p+1} = hc n_s / e(2n + p + 1)$ ($H_{2n+p} = hc n_s / e(2n + p)$), соответствующем фактору заполнения $\nu = 2n + p + 1$ ($\nu = 2n + p$). В итоге получаем

$$\begin{aligned} \Delta_{2n+p+1} &= \\ &= \frac{2E_{F0}}{2n + p + 1} \left[p + 1 - \sqrt{\delta^2 + 2\lambda^2 n(2n + p + 1)} - \right. \\ &\quad \left. - \sqrt{\delta^2 + 2\lambda^2 (2n + p + 1)(n + p + 1)} \right], \quad (5) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Delta_{2n+p} &= \frac{2E_{F0}}{2n + p} \left[-p + \sqrt{\delta^2 + 2\lambda^2 n(2n + p)} + \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{\delta^2 + 2\lambda^2 (2n + p)(n + p)} \right]. \quad (6) \end{aligned}$$

Здесь $E_{F0} = \pi \hbar^2 n_s / m^*$, т. е. величина, равная энергии Ферми вырожденного по спине электронного газа в нулевом магнитном поле; $\lambda^2 = E_0 / E_{F0}$ ($E_0 = m^* \alpha^2 / 2\hbar^2$). Решая уравнение (4) с учетом равенств (5) и (6) при условии $\lambda \ll 1$ и пренебрегая единицей по сравнению с n , получаем выражение для фактора заполнения N_p , соответствующего узлу с номером p :

$$\lambda N_p = \sqrt{(2p + 1)^2 / 16 - \delta^2}. \quad (7)$$

Важным результатом такого рассмотрения является связь четности номера p узла с четностью номеров осцилляций по разные стороны от него. Можно показать [4], что четные (нечетные) значения p соответствуют переходу от четных (нечетных) номеров осцилляций в слабых магнитных полях к нечетным (четным) в сильных. Естественно, что абсолютная точность определения факторов заполнения, соответствующих узлу, по формуле (7) не может быть лучше единицы. Как будет показано ниже сравнением с вычисленными осцилляциями ШдГ

для спектра БР (см. ниже рис. 1 и 6), приведенная формула хорошо описывает положения узлов, которые обычно наблюдаются при больших значениях факторов заполнения. Из формулы (7) прямо получается удобное для обработки экспериментальных результатов выражение для положения узлов H_p в перпендикулярном магнитном поле:

$$\frac{1}{H_p^2} = \frac{\hbar^2 e^2}{2\pi n_s \alpha^2 m^{*2} c^2} \left[\frac{(2p + 1)^2}{16} - \delta^2 \right]. \quad (8)$$

Относительно изменения положения узлов в наклонном магнитном поле см. работы [7, 8]. Отметим, что сформулированный выше критерий был также использован при описании квантовых осцилляций в работе [9].

3. БИЕНИЯ ОСЦИЛЛЯЦИЙ ШУБНИКОВА – ДЕ ГААЗА В ДЫРОЧНЫХ КАНАЛАХ КРЕМНИЕВЫХ ПОЛЕВЫХ ТРАНЗИСТОРОВ

Впервые¹⁾ эффект биений осцилляций ШдГ в ДЭС был обнаружен в работе [4] на образцах дырочных каналов кремниевых полевых транзисторов, т. е. в системе с центром инверсии в объемном материале, в которой спиновое расщепление полностью определяется асимметрией квантовой ямы. Пример такого биения приведен на рис. 1. В узле биения, отмеченном темной вертикальной стрелкой, амплитуда осцилляций имеет локальный минимум, а фаза осцилляций меняется на π . Вдали от узла значения факторов заполнения в соседних минимумах осцилляций ШдГ различаются на двойку. В результате минимумы осцилляций ШдГ левее узла наблюдаются при четных факторах заполнения уровней, а правее — при нечетных. В терминах спектра Ландау с зеемановским расщеплением это феноменологически могло бы интерпретироваться как превалирование циклотронного расщепления в слабых магнитных полях и зеемановского в сильных. Таким образом, именно биения, сопровождающиеся изменением четности факторов заполнения в минимумах осцилляций, являются свидетельством нелинейных зависимостей цикло-

¹⁾ Фактически картина биений на таких образцах наблюдалась ранее в работе [10], однако не была идентифицирована. Особенности осцилляций ШдГ, наблюдавшиеся в дырочных каналах гетероструктур GaAs/AlGaAs в работах [11, 12], очевидно, указывают на наличие двух групп носителей с существенно различающимися плотностями и не имеют формы биений.

тронного и спинового расщеплений от магнитного поля.

Естественно, что изменение положения узла при неизменной плотности дырок сопровождается сменой минимумов на максимумы (и наоборот) между двумя различными положениями узла, как это демонстрируется экспериментальными результатами на рис. 2. Узлы осцилляций в этом эксперименте [13] смещались приложением к образцу одноосной деформации растяжения или сжатия при постоянной плотности дырок. На рис. 2 показаны результаты для деформации сжатия.

В работе [4] было показано, что биения осцилляций ШдГ присущи спектру БР с уширенными уровнями, и была получена формула (8). Расчеты магнитосопротивления для ДЭС с таким спектром представлены на рис. 1 светлыми кривыми. Для согласования экспериментальной и теоретической кривых использовались два подгоночных параметра: транспортное время релаксации, которое было принято равным квантовому и оказалось близким ко времени, определенному из подвижности образца, и величина α . Первый из этих параметров определял абсолютную величину амплитуды осцилляций, а второй — положение узла. Результаты расчета демонстрируют эффект биений с узлом в магнитном поле, положение которого хорошо согласуется с вычисленным по формуле (8). Представленные треугольниками значения энергетических расщеплений на уровне Ферми для не уширенного спектра при целочисленных значениях факторов заполнения ν демонстрируют выполнение критерия равенства расщеплений для двух соседних факторов заполнения, использованного для определения положения узлов. Можно показать, что полужелые значения p в формуле (8) определяют величины магнитных полей, в которых происходит пересечение уровней, и, следовательно, одна из энергетических щелей на уровне Ферми обращается в нуль. Этот факт виден из результатов вычисления щелей, представленных на рис. 1(b), и вычисленной для $p = 5/2$ величины магнитного поля, отмеченной двунаправленной светлой стрелкой.

Отметим, что снятие спинового вырождения в ДЭС, создаваемых в асимметричных квантовых ямах, было отмечено уже в первых численных расчетах (см., например, работу [14] и обзор [15]) энергетического спектра дырочных каналов кремниевых полевых транзисторов в нулевом магнитном поле, основанных на гамильтониане Латтинжера. Вычисленное расщепление демонстрирует кристаллическую анизотропию. При использовании симметрич-

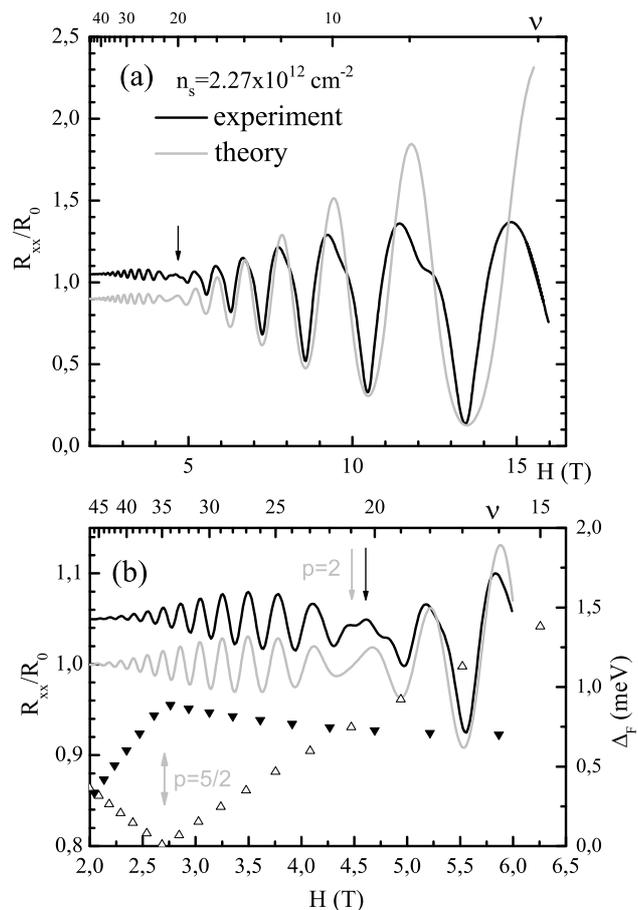


Рис. 1. Экспериментальные и расчетные зависимости магнитосопротивления R_{xx} , нормированные на их значения R_0 в нулевом магнитном поле (сплошные кривые на рис. (a) и (b)). Расчетная кривая на рис. (a) сдвинута вниз на 0.1. На рис. (b) эти зависимости показаны в увеличенном масштабе для лучшей демонстрации эффекта биения осцилляций. На этом же рисунке треугольниками приведены вычисленные величины энергетических щелей на уровне Ферми Δ_F (правая шкала) для не уширенных уровней спектра (2). Измерения выполнены на образце полевого транзистора с дырочным каналом на поверхности Si (110), имеющем плотность дырок $n_s = 2.27 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$. Все вычисления выполнены для этой плотности и значений параметров спектра $\alpha = 2.48 \cdot 10^{-10} \text{ эВ} \cdot \text{см}$, $\delta = 1.08$, $m^* = 0.35m$. При расчете магнитосопротивления использованы одинаковые значения квантового времени τ_q и времени импульсной релаксации τ , равные 0.52 пс. Сплошными темными стрелками на обоих рисунках отмечены экспериментальные положения узла биений. Светлой однонаправленной (двунаправленной) стрелкой на рис. (b) показано положение узла (равного нулю расщепления между соседними энергетическими уровнями на уровне Ферми), вычисленное по формуле (8) для $p = 2$ ($p = 5/2$)

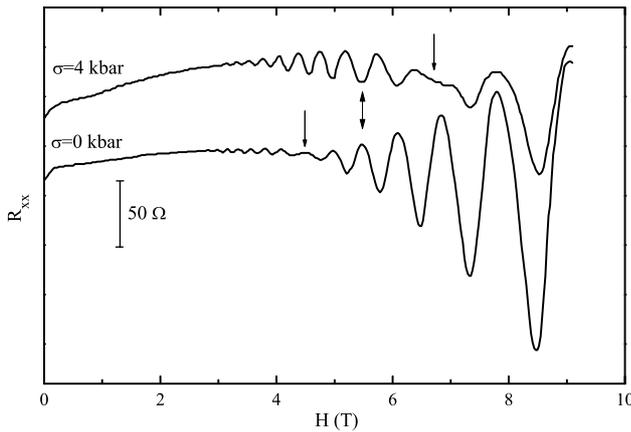


Рис. 2. Изменение картины осцилляций ШдГ в дырочном канале на поверхности Si(110) при приложении одноосного механического напряжения сжатия 4 кбар вдоль направления [001]. $n_s = 2.7 \cdot 10^{12} \text{ см}^{-2}$. Однонаправленные стрелки указывают положения узлов осцилляций ШдГ. Двухнаправленная стрелка отмечает инверсию осцилляций

ной формы гамильтониана Латтинжера это расщепление оказывается пропорциональным третьей степени модуля волнового вектора. Так что использование спектра БР для последовательного количественного анализа результатов и получения параметров спектра двумерных дырок представляется необоснованным. Наиболее достоверные из существующих расчеты спектра двумерных дырок в квантующем магнитном поле были выполнены в работе [16], в центре внимания которой как раз было описание биения осцилляций, наблюдаемого в работе [4]. Автору удалось количественно описать экспериментальную зависимость положения узла от плотности дырок и удовлетворительно объяснить эффект одноосной деформации. Правда, для такого описания понадобились значения параметров гамильтониана Латтинжера, несколько отличающиеся от общепринятых.

4. БИЕНИЯ ОСЦИЛЛЯЦИЙ ШУБНИКОВА – ДЕ ГААЗА В ДВУМЕРНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ КАНАЛАХ

Биения осцилляций ШдГ в электронных каналах были обнаружены в образцах с квантовыми ямами узкозонных полупроводников InAs [17] и InGaAs [18]. Эти результаты послужили триггером исследований биений осцилляций ШдГ и характеризуемого ими спин-орбитального расщепления в таких полупроводниках. Хотя авторы работ [17–20]

интерпретировали свои результаты в терминах спектра БР, возникающего в асимметричных квантовых ямах (structure inversion asymmetry, SIA), для таких материалов всегда остается вопрос, не связано ли спиновое расщепление с отсутствием центра инверсии в массивном материале (bulk inversion asymmetry, BIA). Как будет показано ниже, ответ на этот вопрос можно получить, анализируя экспериментальные результаты по биению осцилляций ШдГ, в частности, с использованием формулы (8). Как показали результаты обработки [7] данных работы [18] (см. также рис. 3), эта формула очень хорошо описывает положение узлов биений осцилляций по магнитному полю и позволяет определить как величину параметра α , так и величину g -фактора электронов.

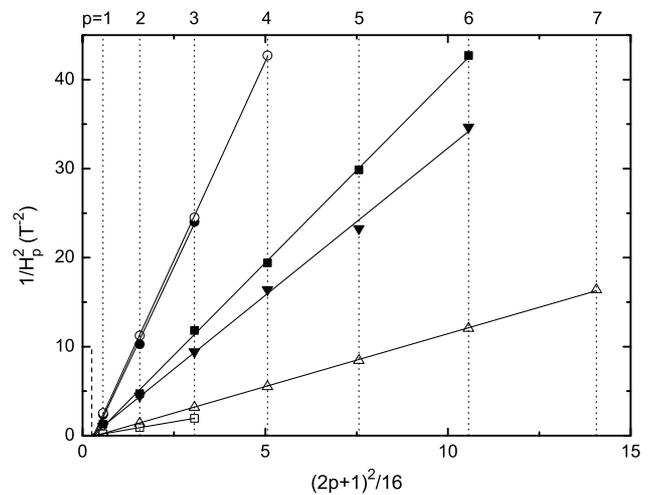


Рис. 3. Зависимости положений $1/H_p^2$ узлов биений осцилляций ШдГ в гетероструктурах с двумерной электронной системой в слоях $\text{In}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$ от $(2p+1)^2/16$. Темные значки — результаты для трех образцов различного состава (величины x) из работы [18]. Светлыми символами приведены данные из работ [21] (кружки), [22] (треугольники) и [23] (квадраты). Прямые линии проведены через экспериментальные точки по методу наименьших квадратов. Вертикальная штриховая линия отмечает значение $(2p+1)^2/16 = 1/4$

На рис. 3 приведены результаты обработки экспериментальных данных для двумерных электронов в квантовых ямах InGaAs, полученных как в работе [18], так и в более поздних работах, в которых наблюдалось несколько узлов биений. В выбранных в соответствии с формулой (8) координатах все данные описываются прямыми линиями, пересекающими горизонтальную ось в близких точках со значениями, немного превышающими

ми 0.25. Согласно формуле (8), эти значения равны $\delta^2 = (1 - gm^*/2m)^2/4$ и должны быть немного больше 0.25 в силу малых значений эффективной массы m^* и отрицательного значения g -фактора в InGaAs. Так, для образцов, использованных в работе [18], эффективная масса равнялась $0.046m$, а обработка данных [7] в наклонном магнитном поле дала значение $g = -2.6$, что очень хорошо согласуется с величинами отрезков, отсекаемых соответствующими прямыми на горизонтальной оси. Правильность нумерации узлов p подтверждается тем фактом, что, как нами было проверено, факторы заполнения в минимумах осцилляций в сильных магнитных полях (превышающих положение последнего по полю узла) являются четными. Из наклона прямых можно определить параметр α , величины которого для образцов, представленных на рис. 3, оказались одного масштаба: $\alpha = 3.7 \cdot 10^{-10}$ эВ · см (образец А [18]), $\alpha = 4.2 \cdot 10^{-10}$ эВ · см (образец В [18]), $\alpha = 2.8 \cdot 10^{-10}$ эВ · см (образец С [18]), $\alpha = 5.3 \cdot 10^{-10}$ эВ · см [21], $\alpha = 4.5 \cdot 10^{-10}$ эВ · см [22], $\alpha = 6.9 \cdot 10^{-10}$ эВ · см [23].

Результаты, представленные на рис. 3, указывают на то, что в квантовых ямах InGaAs основным механизмом снятия спинового вырождения является механизм БР. Это заключение подкрепляется обсуждаемыми ниже данными, приведенными на рис. 4, а также результатами работы [21], в которой наблюдалось исчезновение биений осцилляций ШдГ в специально изготовленной гетероструктуре с симметричной архитектурой.

В полевых транзисторах с проводящими каналами в квантовых ямах InGaAs при изменении затворного напряжения удалось наблюдать изменение картины биений осцилляций ШдГ, связанное с изменением как плотности электронов, так и величины параметра α . Таким образом, удалось управлять спиновой поляризацией при помощи электрического поля, реализовав идеи работы [3]. Эти результаты, однако, были почти исключительно получены из фурье-спектра осцилляций. Как будет показано ниже, использованный метод дает неудовлетворительные результаты для систем со спектром БР. На этом основании мы провели обработку данных этих экспериментов с использованием формулы (8), и на рис. 4 приводим полученные зависимости параметра α от плотности электронов в полевых транзисторах. Для кривых, на которых наблюдалось несколько узлов биений, параметры α и δ^2 определялись независимо аналогично тому, как это делалось для данных, показанных на рис. 3. При этом аналогично результатам на рис. 3 узел в самом

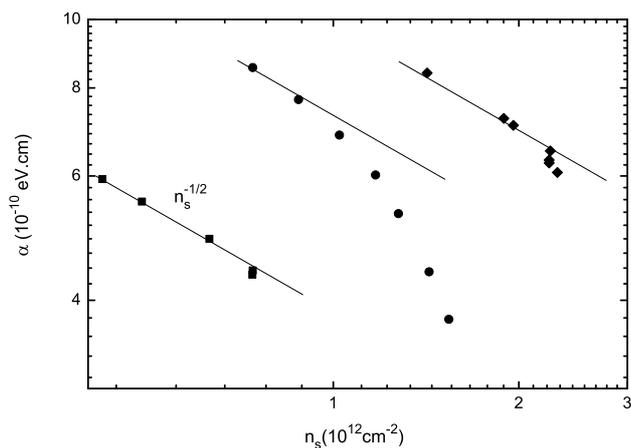


Рис. 4. Зависимости параметров спин-орбитального взаимодействия α от плотности электронов в InGaAs-каналах полевых транзисторов, полученные на основании оригинальных экспериментальных данных работ [24] (ромбы), [25] (кружки) и [21] (квадраты). Сплошными линиями показаны зависимости $\alpha \propto n_s^{-1/2}$

сильном поле имел номер $p = 1$. Для кривых с единственным узлом биений мы проверяли, что минимумы осцилляций в магнитных полях, превышающих положение узла, соответствуют четным факторам заполнения, и приписывали этому узлу номер $p = 1$, значение же δ^2 определялось из кривых с несколькими узлами, измеренных при других затворных напряжениях.

Данные на рис. 4 демонстрируют уменьшение параметра α с возрастанием плотности двумерных электронов n_s , которое сопровождается возрастанием электрического поля между ДЭС и поверхностью гетероструктуры, на которую был нанесен затвор полевого транзистора. Этот результат свидетельствует о доминировании механизма БР, поскольку увеличение упомянутого электрического поля делает профиль потенциала в направлении роста структуры более симметричным в силу того, что в этих образцах слой селективного донорного легирования и затвор располагались по разные стороны от квантовой ямы. В приведенных на рис. 4 результатах заслуживает внимания зависимость $\alpha \propto n_s^{-1/2}$, объяснение которой требует детального теоретического анализа.

Если приведенные выше результаты для квантовых ям InGaAs полностью соответствуют SIA со спектром БР, наблюдения биений осцилляций в квантовых ямах InAs, включая первые сообщения [17, 19], как будет показано ниже, в эту картину не укладываются. Обработка [19] результатов

работы [17] показала необходимость использования положительного значения g -фактора для описания результатов спектром БР. В согласии с этим заключением при обработке результатов по формуле (8) положения узлов попадают на прямую, пересекающую горизонтальную ось в точке с координатой $0.125 < 0.25$ (см. рис. 5), что соответствует положительному значению величины g -фактора. Этот факт, однако, не помешал авторам работы [19] сделать заключение о том, что наблюдаемый ими эффект связан именно с механизмом БР. Это заключение представляется нам неверным, так как g -фактор в массивном InAs отрицателен, $g = -15$. Здесь уместно отметить, что энергетический спектр, обусловленный спиновым расщеплением в объемном материале без центра инверсии (механизм Дрессельхауза), в сферически-симметричном приближении имеет такой же вид, как и спектр (2), с тем отличием, что входящая в него величина δ в этом случае равна $\delta_D = -(1/2)(1 + gm^*/2m)$ [26, 27] и, следовательно, величина δ_D^2 должна быть меньше 0.25 при $g < 0$. Этот результат заставляет думать, что спиновое расщепление, наблюдавшееся в работах [17, 19], в основном обусловлено механизмом Дрессельхауза.

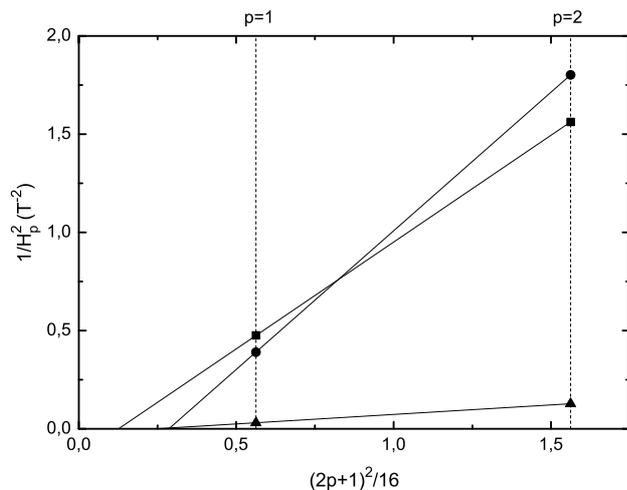


Рис. 5. Зависимости положений $1/H_p^2$ узлов биений осцилляций ШдГ в гетероструктурах с двумерной электронной системой в слоях InAs от $(2p+1)^2/16$ для данных работ [17, 28, 29] (соответственно квадраты, кружки, треугольники)

Нами были обработаны еще несколько результатов, полученных для двумерных электронов в квантовой яме InAs (см. рис. 5). В этом случае, в отличие от данных на рис. 3, прямые пересекают горизонтальную ось в существенно различных точках ($x_0 = 0.125$, $x_0 = 0.28$ и $x_0 = 0.24$) для данных

работ соответственно [17, 28] и [29]. Такое поведение указывает на то, что в исследованных образцах InAs в спиновое расщепление дают вклад механизмы как ВИА, так и SIA, относительная роль которых определяется формой квантовой ямы, т. е. архитектурой конкретной гетероструктуры. Это заключение находится в полном согласии с результатами работы [30], где удалось обнаружить и разделить оба вклада. В присутствии обоих механизмов при малой величине зеемановского расщепления возможно исчезновение биений осцилляций ШдГ [31, 32], как это наблюдалось в слое InAs в работе [33].

В свете предыдущего обсуждения результатов работ [17, 19] вопрос о применимости механизма БР мог бы возникнуть и на основании результатов работы [24], выполненной на ДЭС в слое InGaAs. Авторы этой работы при обработке результатов в рамках спектра БР фактически произвольно выбрали положительное значение g -фактора $g = 4$, что соответствует $\delta^2 = 0.203 < 0.25$ при использованном в работе значении эффективной массы $m^* = 0.05m$. Авторам, однако, не удалось подогнать положения обоих наблюдающихся узлов биений осцилляций ШдГ единым выбором параметра α , и на рис. 5 ими были представлены два значения этого параметра, определяемые из положений двух разных узлов. Между тем положения обоих узлов могут быть описаны при использовании одного набора параметров в спектре (2). Так, из данных, приведенных на рис. 4 работы [24] для $V_g = 0.3$ В, нами были получены следующие значения параметров $\delta^2 = 0.267 > 0.25$ ($g \approx -1.4$), $\alpha = 6.38 \cdot 10^{-10}$ эВ · см. В работе [24] из тех же данных при $g = 4$ получены два значения α , равные примерно $6.4 \cdot 10^{-10}$ эВ · см и $6.9 \cdot 10^{-10}$ эВ · см.

5. ОБ ИСПОЛЬЗОВАНИИ АНАЛИЗА ФУРЬЕ ДЛЯ ОПИСАНИЯ БИЕНИЙ ОСЦИЛЛЯЦИЙ ШУБНИКОВА – ДЕ ГААЗА

К сожалению, хотя в большинстве экспериментальных работ данные по биениям осцилляций ШдГ качественно интерпретировались в терминах спектра БР, для получения параметров этого спектра обычно использовались приближенные подходы (см, например, обзор [34]), зачастую приводившие к неверным результатам. Одним из таких широко использовавшихся подходов, предложенным в работе [25], являлась обработка экспериментальных кривых магнитосопротивления при помощи быстрого преобразования Фурье, дававшего

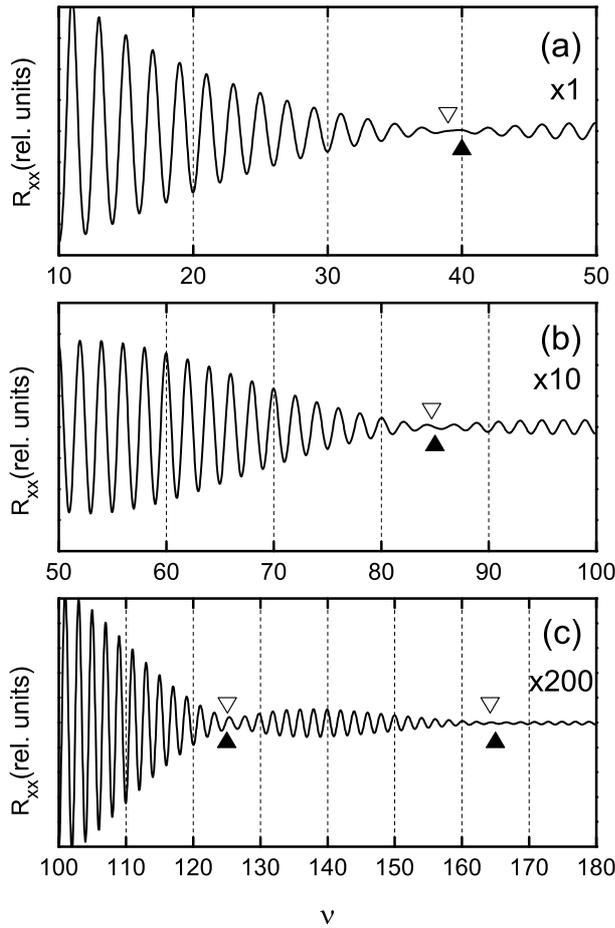


Рис. 6. Осцилляции ШдГ в зависимости от фактора заполнения ν , обратно пропорционального магнитному полю, вычисленные для ДЭС со спектром (2) и параметрами $\delta^2 = 0.294$, $\alpha = 5.34 \cdot 10^{-10}$ эВ · см, полученными из обработки экспериментальных данных, приведенных на рис. 3 работы [21] (показаны на рис. 3 светлыми кружками). Плотность электронов $n_s = 6.1 \cdot 10^{11}$ см $^{-2}$, эффективная масса $m^* = 0.037m$. Рисунки (a)–(c) соответствуют разным факторам заполнения и различным масштабам для величины магнитосопротивления. Темными (светлыми) треугольниками отмечены положения узлов осцилляций, определенные из эксперимента [21] (расчета по формуле (8))

обычно два пика с близкими значениями F_1 и F_2 частоты (имеющей размерность магнитного поля) в полученном фурье-спектре ($F_2 > F_1$). Из этих двух частот определялись две плотности электронов $n_{sj} = eF_j/hc$, которые приписывались двум ветвям закона дисперсии в нулевом магнитном поле. Для спектра $\epsilon^\pm = \hbar^2 k^2/2m^* \pm \alpha k$ из величины площадей на плоскости квазиимпульсов, занимаемых электронами каждой из ветвей, πk_{F1}^2 и πk_{F2}^2 , где $k_{F1, F2}$ —

значения фермиевских квазиимпульсов для соответствующих ветвей, можно прямо получить формулу, связывающую плотности электронов на этих ветвях, n_{s1} и n_{s2} , с параметром α :

$$\alpha = \frac{\hbar^2}{m^*} \sqrt{\pi} (\sqrt{n_{s2}} - \sqrt{n_{s1}}) \approx \frac{\hbar^2 \Delta n_s}{m^*} \sqrt{\frac{\pi}{2n_s}}. \quad (9)$$

Здесь $\Delta n_s = n_{s2} - n_{s1}$ и $n_s = n_{s1} + n_{s2}$. Значение параметра α вычисляется из положения пиков в фурье-спектре по формуле (9). Такой подход является чересчур упрощенным, его основным недостатком является неадекватность описания картины биений осцилляций в ДЭС со спектром (2) в терминах осцилляций двух фиксированных частот, не зависящих от магнитного поля. Разложение в ряд осцилляций плотности состояний на уровне Ферми для спектра (2) было выполнено в работе [6], где в главном порядке по фактору Дингла $\exp(-\pi/\omega_c \tau_q)$ (τ_q — квантовое время релаксации) было получено следующее выражение:

$$D(\epsilon_F) = -\frac{m^*}{\pi \hbar^2} \exp\left(-\frac{\pi}{\omega_c \tau_q}\right) \cos\left(2 \frac{\pi \epsilon_F}{\hbar \omega_c}\right) \times \cos\left(2\pi \sqrt{\delta^2 + \frac{\alpha^2 \tilde{k}_F^2}{\hbar^2 \omega_c^2}}\right). \quad (10)$$

Здесь $\tilde{k}_F^2 = (k_{F1}^2 + k_{F2}^2)/2$. Из этого выражения следует, что разностная частота, стоящая в последнем множителе и определяющая положение узлов биений осцилляций ШдГ, зависит от магнитного поля. Приравняв нулю этот множитель, мы воспроизведем формулу (8).

Чтобы оценить степень точности получения параметра α описанным выше методом, основанным на использовании двух фиксированных значений частот из преобразования Фурье, мы выполнили расчет осцилляций ШдГ для ДЭС со спектром БР, результаты которого приведены на рис. 6 в зависимости от фактора заполнения уровней Ландау $\nu = n_s/N_0$, обратно пропорционального магнитному полю. Параметры спектра были выбраны так, чтобы описать положения узлов, наблюдавшихся в работе [21], формулой (8). На рис. 6 видно прекрасное согласие положений этих узлов с вычисленными положениями, а также с положениями узлов в расчетных кривых магнитосопротивления. Этот факт демонстрирует доминирование механизма БР в спиновом расщеплении исследованной ДЭС, а также хорошую применимость формулы (8) для описания положения узлов осцилляций ШдГ в ДЭС со спектром БР.

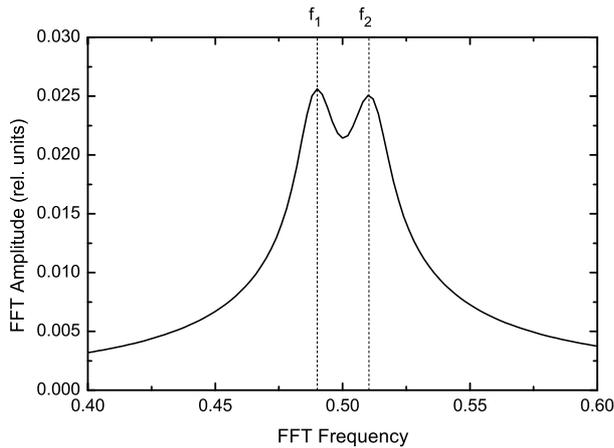


Рис. 7. Амплитуда быстрого преобразования Фурье осцилляций ШдГ, представленных на рис. 6. Вертикальными штриховыми линиями отмечены положения максимумов фурье-спектра, f_1 и f_2

Результат быстрого преобразования Фурье полной картины магнитоосцилляций, представленных на рис. 6, приведен на рис. 7. В этом случае частота размерности не имеет, а $\Delta n_s = n_s(f_2 - f_1)/(f_1 + f_2)$. Если теперь воспользоваться формулой (9), то мы получим значение $\alpha = 4.0 \cdot 10^{-10}$ эВ · см, которое заметно меньше значения $\alpha = 5.34 \cdot 10^{-10}$ эВ · см, заложенного в расчет магнитоосцилляций.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, для двумерных электронных систем со спектром БР в работе представлен и обоснован простой и точный метод определения параметров этого спектра из картины биений квантовых магнитоосцилляций. Проанализированы различные методы обработки данных, применявшиеся в других работах, и исправлены результаты, полученные при помощи неудовлетворительных методов.

Финансирование. Работа выполнена в рамках Госзадания Института физики твердого тела РАН.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ю. А. Бычков, Э. И. Рашба, Письма в ЖЭТФ **39**, 66 (1984).
2. Yu. A. Bychkov and E. I. Rashba, J. Phys. C **17**, 6039 (1984).
3. S. Datta and B. Das, Appl. Phys. Lett. **56**, 665 (1990).
4. С. И. Дорожкин, Е. Б. Ольшанецкий, Письма в ЖЭТФ **46**, 399 (1987).
5. S. G. Novokshonov and A. G. Groshev, Phys. Rev. B **74**, 245333 (2006).
6. С. Г. Новокшонов, ФНТ **39**, 486 (2013).
7. S. I. Dorozhkin, Phys. Rev. B **41**, 3235 (1990).
8. S. I. Dorozhkin, Sol. St. Comm. **72**, 211 (1989).
9. Ю. А. Бычков, В. И. Мельников, Э. И. Рашба, ЖЭТФ **98**, 717 (1990).
10. K. von Klitzing, G. Landwehr, and G. Dorda, Sol. St. Comm. **14**, 387 (1974).
11. H. L. Stormer, Z. Schlesinger, A. Chang, D. C. Tsui, A. C. Gossard, and W. Wiegmann, Phys. Rev. Lett. **51**, 126 (1983).
12. J. P. Eisenstein, H. L. Stormer, V. Narayanamurti, A. C. Gossard, and W. Wiegmann, Phys. Rev. Lett. **53**, 2579 (1984).
13. С. И. Дорожкин, Г. Ландвер, Письма в ЖЭТФ **64**, 630 (1996).
14. F. J. Ohkawa and Y. Uemura, Prog. Theor. Phys. Suppl. **57**, 164 (1975).
15. T. Ando, A. B. Fowler, and F. Stern, Rev. Mod. Phys. **54**, 437 (1982).
16. W. O. G. Schmitt, Phys. Rev. B **50**, 15239 (1994).
17. J. Luo, H. Munekata, F. F. Fang, and P. J. Stiles, Phys. Rev. B **38**, 10142 (1988).
18. B. Das, D. C. Miller, S. Datta, R. Reifenberger, W. P. Hong, P. K. Bhattacharya, J. Singh, and M. Jaffe, Phys. Rev. B **39**, 1411 (1989).
19. J. Luo, H. Munekata, F. F. Fang, and P. J. Stiles, Phys. Rev. B **41**, 7685 (1990).
20. B. Das, S. Datta, and R. Reifenberger, Phys. Rev. B **41**, 8278 (1990).
21. Th. Schäpers, G. Engels, J. Lange, Th. Klocke, M. Hollfelder, and H. Lüth, J. Appl. Phys. **83**, 4324 (1998).
22. Y. S. Gui, C. M. Hu, Z. H. Chen, G. Z. Zheng, S. L. Guo, J. H. Chu, J. X. Chen and A. Z. Li, Phys. Rev. B **61**, 7237 (2000).
23. W. Z. Zhou, T. Lin, L. I. Shang, G. Yu, Z. M. Huang, S. L. Guo, Y. S. Gui, N. Dai, J. H. Chu, L. J. Cui, D. L. Li, H. L. Gao, and Y. P. Zeng, Sol. St. Comm. **143**, 300 (2007).

24. J. Nitta, T. Akazaki, H. Takayanagi, and T. Enoki, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1335 (1997).
25. G. Engels, J. Lange, Th. Schäpers, and H. Lüth, *Phys. Rev. B* **55**, R1958 (1997).
26. J. Schliemann, J. C. Egues, and D. Loss, *Phys. Rev. B* **67**, 085302 (2003).
27. T. Li, B. Horovitz, and O. P. Sushkov, *Phys. Rev. B* **93**, 235316 (2016).
28. J. P. Heida, B. J. van Wees, J. J. Kuipers, T. M. Klapwijk, and G. Borghs, *Phys. Rev. B* **57**, 11911 (1998).
29. T. Matsuyama, R. Kürsten, C. Meißner, and U. Merkt, *Phys. Rev. B* **61**, 15588 (2000).
30. S. D. Ganichev, V. V. Bel'kov, L. E. Golub, E. L. Ivchenko, P. Schneider, S. Giglberger, J. Eroms, J. De Boeck, G. Borghs, W. Wegscheider, D. Weiss, and W. Prettl, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 256601 (2004).
31. С. А. Тарасенко, Н. С. Аверкиев, *Письма в ЖЭТФ* **75**, 669 (2002).
32. N. S. Averkiev, M. M. Glazov, and S. A. Tarasenko, *Sol. St. Comm.* **133**, 543 (2005).
33. S. Brosig, K. Ensslin, R. J. Warburton, C. Nguyen, B. Brar, M. Thomas, and H. Kroemer, *Phys. Rev. B* **60**, R13989 (1999).
34. W. Zawadzki and P. Pfeffer, *Semicond. Sci. Technol.* **19**, R1 (2004).

THE RASHBA SPLITTING IN SmB_6

O. Rader^{a*}, *P. Hlawenka*^a, *K. Siemensmeyer*^a, *E. Weschke*^a, *A. Varykhalov*^a,
J. Sánchez-Barriga^{a,b}, *N. Y. Shitsevalova*^c, *V. B. Filipov*^c,
S. Gabáni^d, *K. Flachbart*^d, *E. D. L. Rienks*^a

^a *Helmholtz-Zentrum Berlin für Materialien und Energie*
 12489, Berlin, Germany

^b *IMDEA Nanoscience*
 28049, Madrid, Spain

^c *Institute for Problems of Materials Science, National Academy of Sciences of Ukraine*
 03142, Kiev, Ukraine

^d *Institute of Experimental Physics, Slovak Academy of Sciences*
 04001, Košice, Slovakia

Received June 16, 2022,
 revised version June 16, 2022
 Accepted June 19, 2022

Contribution for the JETP special issue in honor of E. I. Rashba's 95th birthday

DOI: 10.31857/S0044451022100170

EDN: JUNSJT

The present article highlights two aspects at the intersection between Rashba physics and topological matter. This is firstly the importance of the Rashba splitting for the question whether a topological insulator driven by strong electron correlation has been identified in SmB_6 . Secondly, the unique nature of the Rashba-split surface state on SmB_6 is revealed by comparison to other experimentally investigated cases.

In 1959, Rashba and Sheka noted that in the inversion asymmetric wurtzite structure under spin-orbit coupling the spin splitting perpendicular to the c axis is linear in momentum k causing a ring of extrema in the band dispersion $E(k)$ [1], the observation that is most commonly associated with the Rashba effect. In 1984, Bychkov and Rashba extended the work to quasi two-dimensional systems [2] extending the scientific field further to heterostructures and surfaces [3–5].

Spin-orbit coupling plays a major role in topologically nontrivial matter [6, 7]. Topological insulators are characterized by topological invariants which leads to symmetry protected surface states. These surface

states appear as Dirac cones with a helical spin texture and spin-momentum locking which are known from Rashba-split surface states. The Dirac-cone surface states bridge an inverted bulk band gap and provide in this way surface metallicity in a bulk insulating system, provided the Fermi level is situated in the bulk band gap. The presence or absence of topological surface states can directly be checked by angle-resolved photoelectron spectroscopy (ARPES). The strong topological insulator has an odd number of Dirac-cone surface states per surface Brillouin zone (topological invariant $\nu_0 = 1$), whereas this number is even for trivial materials ($\nu_0 = 0$).

As mentioned above, spin-momentum locking leads to a spin texture that Rashba-type surface states have in common with Dirac-type topological surface states and can be verified by spin-resolved ARPES [3–5]. Another connection between Rashba physics and topologically nontrivial matter is that the topological insulator was at first predicted in a two-dimensional form (where the topologically protected surface states take the form of one-dimensional dissipationless edge states) for graphene under the presence of a sizeable intrinsic spin-orbit interaction [8]. Although carbon is very light, it is in principle possible to impose in the experiment a formally intrinsic spin-orbit interaction in a two-

* E-mail: rader@helmholtz-berlin.de

dimensional material such as graphene, however, the creation of a Rashba-type spin-orbit interaction is also likely in this geometry [9]. Intercalation of an atomic layer of Au leads indeed to the observation of a giant Rashba splitting in the Dirac cone of graphene [10]. Another aspect where Rashba physics becomes important in topological matter deals with the properties of SmB₆.

Topological insulators are a band structure effect, and an interesting question is whether a topological insulator exists that is caused by strong electron correlation. The material class that has attracted most interest are topological Kondo insulators [11, 12] and in particular SmB₆ [13]. A Kondo insulator has a small band gap due to the Kondo effect, i. e., in this case the hybridization of itinerant conduction electrons and localized f electrons. It was understood that the odd parity of the f states together with the even parity of d states can lead to an inverted bulk band gap and a topological insulator phase [12]. In calculations for the (100) surface of SmB₆, e. g., in Ref. [13], an odd number of Dirac cone surface states per surface Brillouin zone, as required for a strong topological insulator, was predicted. Several groups observed in ARPES these surface states. In Fig. 1 we show the main features of these data. Four Fermi surface ellipses appear centered at the \bar{X} point (two per surface Brillouin zone) and a surface state at the center $\bar{\Gamma}$, which give an odd number of Dirac cone surface states per surface Brillouin zone, corresponding to a strong topological insulator.

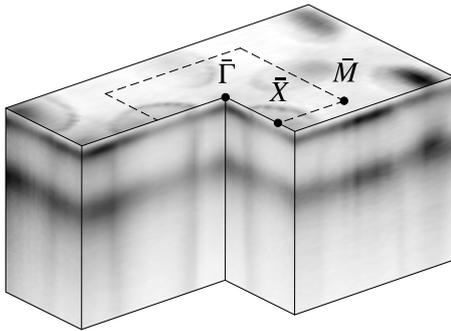


Fig. 1. ARPES data of the Fermi surface of SmB₆(100) showing surface-state contours at the \bar{X} points. An additional surface state is observed at the center $\bar{\Gamma}$

Practically all ARPES studies agreed and have been interpreted in favor of a topologically nontrivial character of of SmB₆, although no Dirac-cone dispersion

appears in the data, as can also be seen in Fig. 1. The high quality of our SmB₆ crystals enabled us to observe the dispersion of the $\bar{\Gamma}$ surface state in detail for the first time [14]. For SmB₆ crystals with a B termination of the cleaved surface, the $\bar{\Gamma}$ surface state shows a Rashba splitting [14]. This means that it is not possible anymore to reach an odd number of Dirac cones in the surface Brillouin zone, no matter whether the two ellipses at \bar{X} in the surface Brillouin zone are part of the predicted Dirac-cone surface states or not. New data show the behavior of the Rashba splitting with different light polarization and with surface contamination. Upon surface contamination, the state at $\bar{\Gamma}$ vanishes which is not expected from a robust topological surface state. The \bar{X} state, on the other hand, is robust. We find that this robustness is due to the fact that the state stems from the hybridization of f and d bulk states which are surface-shifted by 10 meV [14]. Because the bulk gap is smaller than 10 meV, the \bar{X} surface state renders the surface metallic, this is the case for B and Sm termination and even more so for surfaces exposed to air [14]. The 10 meV-shift appears also in scanning tunneling spectroscopy [15] and is consistent with published scanning tunneling spectroscopy data.

We determine a Rashba parameter α_R of only $(3.5 \pm 0.1) \cdot 10^{-12}$ eV · m. Because the Rashba splitting is proportional to the effective mass,

$$\Delta k_{\parallel} = \frac{m^* \alpha_R}{\hbar^2}, \quad (1)$$

which has a large value $m^* \approx 17m_e$ (with electron mass m_e) due to the strong $4f$ character, we are able to observe the Rashba splitting in the ARPES experiment. This peculiarity of f -derived surface states is highlighted in Fig. 2, which also shows that the Rashba splitting in momentum space of SmB₆ is of record size as compared to other surfaces. A large Rashba splitting in momentum space is important in spintronics since it allows for a small channel length in a spin field effect transistor.

In conclusion, the Rashba splitting of the $\bar{\Gamma}$ surface state of SmB₆(100) has been investigated. Because of its very large effective mass it has a record momentum offset at a rather small Rashba parameter. Only for this reason, it was possible to observe its splitting which is essential to characterize the surface electronic structure of SmB₆ as trivial. The reason for the robust surface metallicity of SmB₆ lies in the surface state at \bar{X} . The state is a surface shifted $5d-4f$ hybrid and trivial where the very small surface shift of 10 meV is sufficient to bridge the bulk band gap.

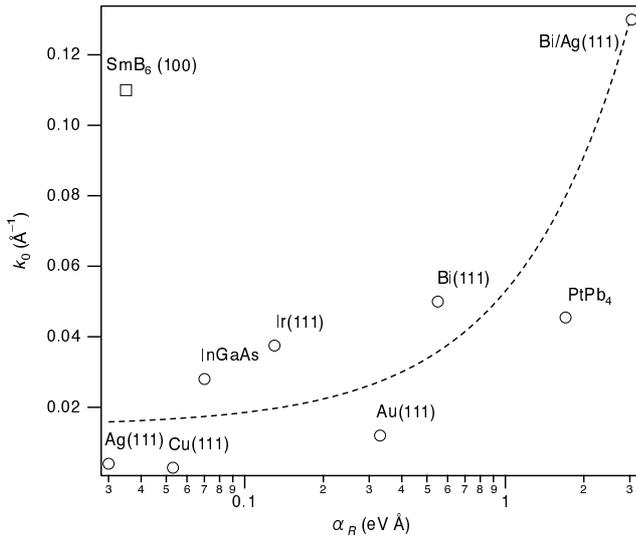


Fig. 2. Rashba splittings in momentum space for different systems. The case of SmB_6 is unique due to the strong $4f$ character and high effective mass

Funding. This work was supported by the Deutsche Forschungsgemeinschaft (SPP 1666). J. S.-B. acknowledges financial support from the Impuls- und Vernetzungsfonds der Helmholtz-Gemeinschaft under grant No. HRSF-0067.

The full text of this paper is published in the English version of JETP.

REFERENCES

1. E. I. Rashba and V. I. Sheka, *Fizika Tverd. Tela. Collected Papers* **2**, 162 (1959). Translation in the supplementary material of G. Bihlmayer, O. Rader, and R. Winkler, *New J. Phys.* **17**, 050202 (2015).
2. Yu. A. Bychkov and E. I. Rashba, *JETP Lett.* **39**, 78 (1984).
3. A. Manchon, H. C. Koo, J. Nitta, S. M. Frolov, and R. A. Duine, *Nat. Mater.* **14**, 871 (2015).
4. G. Bihlmayer, O. Rader, and R. Winkler, *New J. Phys.* **17**, 050202 (2015).
5. H. W. Yeom and M. Grioni (eds.), Special issue on electron spectroscopy for Rashba spin-orbit interaction, *J. El. Spectr. Relat. Phenom.* **201**, 2 (2015).
6. M. Z. Hasan and C. L. Kane, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 3045 (2010).
7. X.-L. Qi and S.-C. Zhang, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1057 (2010).
8. C. L. Kane and E. J. Mele, *Phys. Rev. Lett.* **95**, 226801 (2005).
9. M. Gmitra, S. Konschuh, C. Ertler, C. Ambrosch-Draxl, and J. Fabian, *Phys. Rev. B* **80**, 235431 (2009).
10. D. Marchenko, A. Varykhalov, M. R. Scholz, G. Bihlmayer, E. I. Rashba, A. Rybkin, A. M. Shikin, and O. Rader, *Nat. Commun.* **3**, 1232 (2012).
11. M. Dzero and V. Galitski, *JETP* **117**, 499 (2013).
12. M. Dzero, K. Sun, V. Galitski, and P. Coleman, *Phys. Rev. Lett.* **104**, 106408 (2010).
13. V. Alexandrov, M. Dzero, and P. Coleman, *Phys. Rev. Lett.* **111**, 226403 (2013).
14. P. Hlawenka, K. Siemensmeyer, E. Weschke, A. Varykhalov, J. Sánchez-Barriga, N. Y. Shitsevalova, A. V. Dukhnenko, V. B. Filipov, S. Gabáni, K. Flachbart, O. Rader, and E. D. L. Rienks, *Nat. Commun.* **9**, 517 (2018).
15. H. Herrmann, P. Hlawenka, K. Siemensmeyer, E. Weschke, J. Sánchez-Barriga, A. Varykhalov, N. Y. Shitsevalova, A. V. Dukhnenko, V. B. Filipov, S. Gabáni, K. Flachbart, O. Rader, M. Sterrer, and E. D. L. Rienks, *Adv. Mater.* **29**, 1906725 (2020).

К СВЕДЕНИЮ АВТОРОВ

В ЖЭТФ публикуются статьи, содержащие изложение оригинальных научных результатов, не опубликованных и не предназначенных к публикации в другом месте. В отдельных случаях по заказу редколлегии публикуются актуальные статьи обзорного характера.

Редакция ЖЭТФ принимает статьи как на русском, так и на английском языках. С 1 сентября 2016 г. по требованию МАИК статьи, поступившие в редакцию на английском языке, будут переводиться на русский язык для русскоязычной версии журнала.

Редакция рекомендует направлять статьи в электронном виде по электронной почте или загружать их в режиме «on-line» через сайт журнала <http://jetp.ac.ru/>

Издательство требует от авторов при публикации статьи заключения договора о передаче авторских прав. Заполненные и подписанные договоры (форма договоров отправляется авторам **ВМЕСТЕ С КОРРЕКТУРОЙ**) могут быть представлены лично или по электронной почте в отсканированном виде (PDF файлы).

По всем вопросам можно обращаться в редакцию.

Адрес: 117334, Москва, ул. Косыгина, д. 2, Редакция ЖЭТФ

E-mail: jetp@kapitza.ras.ru Телефон: +7 (499) 137 56 22

Главный редактор *А. И. СМИРНОВ*

Редколлегия:

канд. физ.-мат. наук Ю. С. БАРАШ, д-р физ.-мат. наук И. Г. ЗУБАРЕВ,
д-р физ.-мат. наук Е. И. КАЦ (зам. гл. редактора, представительство ЖЭТФ во Франции),
д-р физ.-мат. наук В. П. КРАЙНОВ, акад. М. В. САДОВСКИЙ, канд. физ.-мат. наук С. С. СОСИН,
член-корр. РАН С. В. ТРОИЦКИЙ (зам. гл. редактора), д-р физ.-мат. наук А. В. ФИЛИППОВ,
член-корр. РАН И. А. ФОМИН (зам. гл. редактора),
д-р физ.-мат. наук Д. Е. ХМЕЛЬНИЦКИЙ (зам. гл. редактора, представительство ЖЭТФ
в Великобритании),
д-р физ.-мат. наук А. А. ЦЕЙТЛИН, акад. А. М. ЧЕРЕПАЩУК

Редакционный совет:

акад. А. Ф. АНДРЕЕВ (председатель),
член-корр. РАН В. В. ЛЕБЕДЕВ, д-р физ.-мат. наук В. С. ПОПОВ

Зав. редакцией Н. Г. Церевитинова
Редакторы: Л. Б. Кульчицкая, Т. Г. Орехова, Т. Н. Смирнова