

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
НИЖЕГОРОДСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ИМ. Н.И. ЛОБАЧЕВСКОГО

На правах рукописи

Хомицкий Денис Владимирович

**Квантовые состояния, оптика и холловская
проводимость блоховских электронов и дырок в
магнитном поле**

01.04.07 – физика конденсированного состояния

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель –
д.ф.-м.н. профессор
В.Я. Демиховский

Нижний Новгород

2003г

Содержание

Введение	3
Глава 1. Квантовые состояния и холловская проводимость блоховских электронов в магнитном поле. Спектр и магнитооптика двумерного дырочного газа (обзор)	20
1.1. Магнитные трансляции и магнитная ячейка	22
1.1.1. Общие свойства трансляций в магнитном поле	22
1.1.2. Пример: магнитные трансляции в плоской квадратной решетке	24
1.2. Магнитные блоховские состояния в методе сильной связи	27
1.2.1. Уравнение Харпера и ”бабочка” Хофштадтера	27
1.2.2. Трёхмерные задачи.	34
1.3. Метод слабой связи для электрона с параболическим законом дисперсии в магнитном поле	35
1.4. Квантовые состояния и магнитооптика дырок, описываемых гамильтонианом Латтинжера	42
1.4.1. Четырёхкомпонентные волновые функции и спектр 2D дырок в магнитном поле	42
1.4.2. Магнитооптика межзонных переходов	50
1.5. Квантование холловской проводимости в латерально модулированных системах	53
1.6. Экспериментальные результаты наблюдения ”бабочки” Хофштадтера	60

Глава 2. Трёхмерные кристаллы в сверхсильном магнитном поле	65
2.1. Формирование новых поверхностей Ферми в простой кубической решётке	65
2.2. Приложение к одновалентным металлам с ГЦК решёткой	79
2.2.1. Квантовые состояния и поверхности Ферми для ориентации поля вдоль $(0, 0, 1)$	81
2.2.2. Квантовые состояния и поверхности Ферми для ориентации поля вдоль $(1, 1, 0)$	92
2.2.3. Полная энергия электронов и магнитная восприимчивость	101
Глава 3. Квантовые состояния и магнитооптика 2D дырок	106
3.1. Магнитные блоховские функции и спектр 2D дырок	106
3.2. Расчёт интенсивностей межзонных оптических переходов	117
Глава 4. Квантование холловской проводимости дырок в периодическом потенциале	123
4.1. Топологические свойства нулей волновой функции в координатном пространстве	123
4.2. Расчёт холловской проводимости	126
Заключение.	136
Библиография.	139

Введение

Актуальность работы

Изучение состояний блоховского электрона в магнитном поле - одна из актуальных проблем теории конденсированного состояния и, в частности, физики микроструктур. На протяжении нескольких десятилетий эта проблема неизменно привлекает внимание физиков. Дело в том, что действие магнитного поля и периодического потенциала на электрон существенно различается по своей природе: магнитное поле формирует дискретные уровни (уровни Ландау), в то время как периодический потенциал приводит к образованию энергетических зон. В пионерских работах Харпера [1, 2], Зильбермана [3, 4], Азбеля [5], Зака [6, 7] и Хофштадтера [8] были установлены принципиальные свойства квантовых состояний двумерного блоховского электрона, помещённого в перпендикулярное магнитное поле. В частности, было показано, что в случае, когда величина магнитного потока Φ через элементарную ячейку сопоставима с квантом потока $\Phi_0 = 2\pi\hbar c/|e|$, формируется сложный энергетический спектр, нетривиально зависящий от числа квантов потока $\alpha = \Phi/\Phi_0$. Д. Заком было показано [6, 7], что классификация квантовых состояний может быть проведена в конечном виде лишь в случае, когда α рационально, т.е. $\Phi/\Phi_0 = p/q$, где p и q - целые взаимно

простые числа. При этом в случае сильного периодического потенциала спектр состоит из q подзон. Первое графическое построение такого спектра при различных значениях магнитного потока было осуществлено в 1976 году Д. Хофштадтером [8], причём ввиду своего внешнего сходства этот спектр получил название "бабочки" Хофштадтера. Если же величина магнитного потока является иррациональным числом, то спектр имеет характер канторовского множества.

В настоящее время в основе всех расчетов осцилляционных термодинамических и кинетических явлений (магнитоакустических, оптических и транспортных) в металлах и полупроводниках, помещенных в квантующее магнитное поле, лежит представление о дискретных энергетических электронных уровнях. Эти уровни можно найти, например, в квазиклассическом приближении Лифшица-Онзагера. В то же время уже в работах Азбеля [5], Хофштадтера [8] и Таулесса [9] было показано, что с ростом напряженности магнитного поля вырождение магнитных уровней снимается и каждый уровень Ландау расщепляется на магнитные подзоны, что имеет место и для в случае нескольких взаимодействующих уровней Ландау [10]-[14]. Однако, несмотря на всю привлекательность проблемы, спектры типа "бабочки" Хофштадтера в реальных кристаллах до настоящего времени не наблюдались экспериментально. Дело в том, что для проведения такого эксперимента (на обычных 3D кристаллах со стандартной постоянной решетки) требуются сверхсильные магнитные поля. Если постоянная решетки составляет несколько ангстрем, то условие $p/q = 1$ будет выполнено в магнитном поле с индукцией порядка 100 МГс. Такие поля в настоящее

время ещё не получены, однако во ВНИИЭФ (г. Саров) уже генерируются сверхсильные взрывные магнитные поля с напряженностью до 28 МГс [15]. Численные оценки показывают, что в кристаллах с постоянной решетки порядка и более шести ангстрем в магнитном поле $B=28$ МГс можно выполнить условие $p/q = 1/3$ и провести измерения магнитной восприимчивости и электронного транспорта. В диссертации показано, что при таких значениях магнитного потока в реальных 3D кристаллах можно ожидать проявления качественно новых физических эффектов, в том числе фазовых переходов металл-полупроводник, парамагнетизма электронного газа, осцилляций де Гааза - Ван Альфена с новыми периодами, определяемыми геометрией изменившейся поверхности Ферми. Поэтому рассматриваемая в диссертации проблема представляется нам актуальной не только с точки зрения фундаментальной науки, но и в плане постановки реальных экспериментов.

В настоящее время наиболее перспективными объектами для исследования состояний блоховских электронов в магнитном поле являются искусственные кристаллы – упорядоченные 2D решётки квантовых точек и антиточек, созданные с помощью метода электронной литографии [16]-[21]. Такие структуры служат экспериментальными образцами в большинстве исследований по транспорту и оптике блоховских электронов в магнитном поле. Дело в том, что в этих искусственных 2D кристаллах основной параметр - число квантов потока на ячейку - может изменяться в широких пределах и принимать значения много больше единицы. Для этого в решетках с периодом $a = 100$ нм магнитное поле должно иметь порядок 10 тесла. Длина пробега в подобных

структурах значительно превышает период решётки. При этом нужно учесть, что магнитооптические эксперименты и, в первую очередь, наблюдение магнитолюминисценции в 2D структурах обычно проводятся в диапазоне частот, соответствующих переходам из валентной зоны в зону проводимости [22]-[24]. Поэтому для теоретического описания подобных экспериментов необходимо рассмотреть квантовые состояния с учетом сложной валентной зоны исходного полупроводника, что требует расчёта магнитных блоховских состояний в гетеропереходе p -типа. Следует отметить, что гетеропереходы p - типа с латеральной сверхрешёткой квантовых точек уже начинают использоваться в экспериментах [21]. Насколько нам известно, задача о блоховском электроном в магнитном поле в многозонном приближении впервые рассмотрена в настоящей диссертации. Решение подобной задачи позволяет дать адекватную интерпретацию магнитооптическим экспериментам.

Ещё одна задача, а именно расчёт квантования холловской проводимости двумерного электронного газа в присутствии периодического потенциала, на протяжении ряда лет привлекает внимание исследователей. В этой области получен ряд важных результатов принципиального характера. Таулессом с сотрудниками [9] было показано, что холловская проводимость каждой магнитной подзоны, образованной из одного уровня Ландау, составляет не дробную часть холловской проводимости этого уровня, а целое кратное этого значения. Другими словами, заполненная магнитная подзона переносит целое число единиц холловского тока, приходящегося на один уровень Ландау. Кроме того, Комото [25] и Усовым [26] было показано, что квантованное значение

холловской проводимости заполненной магнитной подзоны определяется количеством и типом особенностей волновой функции как функции волнового вектора. Следует отметить, что в этих работах использовалась простая модель исходного электронного спектра с параболическим законом дисперсии. Первые экспериментальные свидетельства расщепления уровней Ландау в систему магнитных подзон были получены в [18] при измерении продольного магнетосопротивления. В недавней работе [20] были проведены первые эксперименты по измерению холловского сопротивления в сверхрешетке квантовых антиточек, созданных на поверхности гетероперехода n - типа. Результаты этой работы также свидетельствуют о расщеплении периодическим потенциалом уровней Ландау на систему магнитных подзон. В диссертации подходы, развитые в упомянутых работах, обобщаются на случай многозонного спектра 2D дырок в гетеропереходе p -типа. Такое обобщение представляется нетривиальным, поскольку требует учета взаимодействия как различных подзон размерного квантования, так и различных ветвей дырочного спектра, для которых волновая функция является многокомпонентной. Решение этой задачи позволит в рамках 4-зонной модели учесть влияние спина и спин-орбитального взаимодействия на характер целочисленного КЭХ в присутствии внешнего периодического потенциала, что может быть проверено экспериментально.

Цели и задачи работы

Во всех предшествующих работах при расчётах квантовых состояний блоховского электрона в магнитном поле использовались простые моде-

ли исходного спектра. Так, при использовании метода сильной связи [8], [27] - [30] рассматривались лишь двумерные решётки, а для трёхмерных кристаллов [31] - [34] – только кристаллы с простой кубической симметрией. В приближении слабой связи, где изучается расщепление уровня Ландау на магнитные подзоны [9], [10]-[14], принималась гипотеза об электроны с параболическим законом дисперсии. Целью настоящей диссертации является исследование квантовых состояний, оптики и холловской проводимости блоховских электронов в более реалистических 3D и 2D структурах, помещённых в сильное магнитное поле. В связи с этим в диссертации сформулированы и решены две группы задач.

В первой группе в рамках приближения сильной связи исследуются электронные состояния в 3D кристаллах, помещённых в магнитное поле с различной ориентацией. Для волновых функций, удовлетворяющих условиям Блоха - Пайерлса, изучаются свойства уравнения Шрёдингера, которое в данном приближении является разновидностью уравнения Харпера. Показано, что в 3D кристаллах его энергетический спектр представляет систему перекрывающихся магнитных подзон, построенных для простой кубической и гранецентрированной решётки. Для некоторых простых рациональных значений магнитного потока и различных ориентаций магнитного поля построены поверхности Ферми в магнитных подзонах. Проведён расчет магнитной восприимчивости и сделаны заключения о модификации эффекта де Гааза - Ван Альфена в сверхсильных магнитных полях.

Во второй группе задач решается задача о квантовых состояниях дырок, описываемых гамильтонианом Латтинжера и помещённых в пе-

риодическое поле решётки квантовых точек (антиточек). Для решения этих задач используется другой подход, который представляет собой обобщение метода разложения искомой волновой функции по квантовым состояниям Ландау. В диссертации этот метод, использованный для изучения магнитных блоховских состояний электрона с простым законом дисперсии [9], [10] - [14], впервые обобщается на случай сложного многозонного спектра дырок с учётом нескольких подзон размерного квантования. Исследуются спектры магнитных подзон типа "бабочки" Хофштадтера и четырёхкомпонентные волновые функции дырок. Устанавливаются правила отбора для переходов между магнитными подзонами валентной зоны и зоны проводимости для электромагнитного излучения циркулярной поляризации. В работе исследуется также закон квантования холловской проводимости в гетеропереходах p -типа с laterальной сверхрешеткой. Обсуждается совместное влияние потенциала гетероперехода, тяжелых и легких дырок на холловскую проводимость дырочных магнитных подзон и устанавливаются законы квантования холловской проводимости в системах со спин-орбитальным взаимодействием.

Научная новизна диссертации

1. Впервые предложена модель формирования новых поверхностей Ферми в трёхмерных кристаллах, помещённых в сверхсильное магнитное поле. В рамках приближения сильной связи найдена электронная функция в сильном магнитном поле и построены новые поверхности Ферми.

2. Установлена связь геометрии новых поверхностей Ферми с новыми физическими эффектами, возникающими в электронном газе одновалентных металлов с ГЦК решёткой. Впервые предсказаны фазовые переходы металл-полуметалл в сильном магнитном поле, парамагнетизм электронного газа, новые серии осцилляций де Гааза - Ван Альфена с периодами, определяемыми геометрией поверхности Ферми при рациональном магнитном потоке.
3. На примере двумерных дырок в гетеропереходе GaAs/AlGaAs впервые поставлена и решена задача о многокомпонентных квантовых состояниях со спектрами типа "бабочки" Хофштадтера. Выполнены расчёты энергетического спектра дырочных магнитных подзон и волновых функций в широком интервале магнитных полей.
4. Впервые проведён расчёт вероятностей магнитооптических переходов между уровнями мелких донорных примесей, локализованных в гетеропереходе, и дырочными магнитными подзонами.
5. Впервые исследован закон квантования холловской проводимости в периодическом потенциале для четырёхкомпонентных дырочных состояний. Поставлен и обсуждается вопрос о совместном влиянии спина, спин-орбитального взаимодействия и периодического потенциала на топологический инвариант (первый класс Черна), определяющий холловскую проводимость заполненных магнитных подзон.

Практическая значимость

Рассчитанные эффекты трансформации топологии поверхности Ферми и ее влияния на осцилляционные эффекты типа де Гааза - Ван Альфена становятся доступны экспериментальному наблюдению и технологическому применению по мере развития техники экспериментов по генерации сверхсильных магнитных полей и ее приложений (ВНИИЭФ, г. Саров). Последние достижения в этой области, представленные на Международной конференции (см. [44]), подтверждают интерес к теме диссертации.

Результаты расчета квантовых состояний и магнитооптики 2D дырочного газа в гетеропереходах GaAs/AlGaAs, помещенном в магнитное поле и поле латеральной сверхрешетки, могут быть использованы как для экспериментальной проверки влияния эффектов спин-орбитального взаимодействия на блоховские электроны в магнитном поле, так и для изучения новых возможностей физики и технологии полупроводниковых гетероструктур с квантовыми точками. Изучение магнитооптики и квантового эффекта Холла в 2D газе дырок, возмущенном периодическим потенциалом, становится предметом интереса экспериментаторов, о чем свидетельствуют, в частности, доклады, представленные на последних международных конференциях (см. [41] и [43]).

Основные научные положения, выносимые на защиту

1. Электронная волновая функция, построенная в приближении сильной связи в трёхмерных кристаллах, помещённых в магнитное поле, удовлетворяет условиям Пайерлса при трансляциях. Уравнение Шрёдингера для такой функции представляет собой обобщение уравнения Харпера.
2. Электроны в металлах, помещённых в сверхсильное магнитное поле, характеризуются новой поверхностью Ферми, определяемой взаимной ориентацией кристаллической решётки и магнитного поля, а также величиной магнитного потока сквозь площадь, выделяемую в решётке.
3. Геометрия новых поверхностей Ферми обуславливает новые физические эффекты, возникающими в электронном газе одновалентных металлов с ГЦК решёткой. В их числе фазовые переходы металл-полуметалл, парамагнетизм электронного газа, новые серии осцилляций де Гааза - Ван Альфена с периодами, определяемыми геометрией поверхности Ферми при рациональном магнитном потоке.
4. Волновая функция для многокомпонентных квантовых состояний дырок в гетеропереходе p -типа с поверхностной сверхрешёткой квантовых точек удовлетворяет условиям Пайерлса при трансляциях в магнитном поле. Энергетические спектры в широком интервале магнитных полей имеют структуру типа "бабочки" Хоф-

штадтера.

5. Вероятности магнитооптических переходов между уровнями мелких донорных примесей, локализованных в гетеропереходе, и дырочными магнитными подзонами, принадлежащими различным уровням Ландау, характеризуются различной поляризацией и интенсивностью излучения.
6. Четырёхкомпонентным дырочным состояниям сопоставлен топологический инвариант (первый класс Черна), определяющий холловскую проводимость заполненных магнитных подзон.

Апробация результатов

По результатам исследований, отраженных в диссертации, опубликовано 17 научных работ, из них 4 журнальные статьи [35]-[38], 1 статья в сборнике [39], 1 статья на Web-сервере электронных публикаций [40], а также 11 работ в сборниках материалов и тезисов конференций [41]-[51]. Основные положения и результаты работы докладывались и обсуждались на следующих конференциях и семинарах:

1. The 15th International Conference on High Magnetic Fields in Semiconductor Physics (Oxford, UK, 2002).
2. Восьмая и Девятая Международные конференции по генерации мегагауссных магнитных полей и родственным экспериментам (Tallahassee, USA, 1998. Москва - С.-Петербург, 2002г).
3. Десятый Международный симпозиум "Nanostructures. Science and Technology" (С.-Петербург, 2002г).

4. Третий, Четвёртый и Пятый Международные научно-практические семинары серии "Капица" (ВНИИЭФ, г.Саров, 1999 – 2001гг).
5. Пятая Российская конференция по физике полупроводников (Н. Новгород, 2001г).
6. Тридцать второе Всероссийское совещание по физике низких температур (Казань, 2000г).
7. Всероссийские совещания "Нанопотоника" (Н. Новгород, 2002, 2003гг).
8. Вторая Всероссийская конференция научно-образовательных центров в рамках программы "Фундаментальные исследования и высшее образование" (Краснодар, 2002г).
9. XIX научные чтения имени академика Н.В. Белова (Н. Новгород, 2000г).
10. Конференция "Структура и свойства твёрдых тел" (Н. Новгород 1999г).
11. Пятая, Шестая и Седьмая Нижегородские сессии молодых ученых (Н. Новгород, 2000 – 2002гг).

Краткое содержание работы

Диссертация состоит из введения, четырёх глав, заключения и списка литературы из 116 наименований. Объём диссертации составляет 155 страниц. В диссертации приведено 38 рисунков.

Во Введении рассматривается актуальность работы, формулируются её цели и положения, выносимые на защиту. Обсуждаются методы и подходы к решению поставленных задач, описывается новизна, практическая значимость и апробация работы.

В первой главе приводится обзор работ, послуживших стимулом к исследованиям, изложенным в диссертации. В п.1.1 рассматриваются основные свойства трансляций в магнитном поле, обсуждается проблема выбора магнитной элементарной ячейки и магнитной зоны Бриллюэна (п.1.1.1). В п.1.1.2 общие результаты дополняются примером для 2D квадратной решётки. В п.1.2-1.3 обсуждаются два предельных подхода к задаче о блоховском электроне в магнитном поле, применяемые в случае слабого магнитного поля (метод сильной связи), и в случае слабого периодического потенциала (метод слабой связи). В п.1.2 обсуждаются задачи о 2D (п.1.2.1) и 3D (п.1.2.2) блоховском электроне в магнитном поле, рассмотренные в рамках приближения сильной связи, начиная с классической "бабочки" Хофштадтера [8]. В п.1.3 рассматривается приближение слабой связи. Излагаются основные результаты, полученные при расчёте квантовых состояний электронов, находящихся в нижней подзоне размерного квантования зоны проводимости гетеропереходов n -типа с искусственно созданной 2D сверхрешёткой квантовых точек [13, 14]. Такие структуры используются в настоящее время в экспериментах по транспорту [16] - [19], [20] и оптике [22] блоховских электронов в магнитном поле. Далее в п.1.4 рассматривается задача о многокомпонентных дырочных состояниях в подзонах размерного квантования, относящихся к валентной зоне в гетеропереходах p -типа, по-

мещённых в перпендикулярное магнитное поле. В п.1.4.1 описываются свойства спектра и волновых функций гамильтониана Латтинжера, в который входит магнитное поле и потенциал одиночного гетероперехода. В п.1.4.2 обсуждаются магнитооптические свойства двумерного дырочного газа.

В п.1.5 излагаются основные результаты, полученные в задаче о квантовании холловской проводимости двумерного электронного газа в периодическом потенциале. Рассматриваются теоретические подходы и обсуждаются необходимые для дальнейшего рассмотрения топологические понятия.

В заключительном п.1.6 первой главы обсуждаются результаты экспериментов по наблюдению "бабочки" Хофштадтера в различных экспериментах, как с участием блоховских электронов в магнитном поле, так и с другими объектами.

Во второй главе рассматривается задача о квантовых состояниях и поверхностях Ферми для 3D кристаллов с простой кубической и ГЦК решётками, помещённых в сверхсильное магнитное поле. Вначале в п.2.1 проводится рассмотрение кристаллов с простой кубической решёткой. В приближении сильной связи строится электронная волновая функция, удовлетворяющая обобщённым условиям Блоха - Пайерлса. Рассчитывается энергетический спектр и строятся поверхности Ферми для простых значений числа квантов магнитного потока $(1/2, 1/3)$ через грань элементарной ячейки. В этом же пункте изучаются квантовые состояния и поверхности Ферми в простой кубической решётке для ориентации поля вдоль $(1, 1, 0)$ при $p/q = 1/2$. Далее в

п.2.2 проводится расчёт квантовых состояний для одновалентных металлов с ГЦК решёткой. На основе анализа геометрии новых поверхностей Ферми показывается, что физические свойства таких металлов могут радикально измениться в сверхсильном магнитном поле. Так, в п.2.2.1 показано, что в ориентации $\mathbf{H} \parallel (0, 0, 1)$ при чётных значениях знаменателя p/q , когда имеет место касание энергетических зон, металл превращается в диэлектрик (полуметалл). При нечётных значениях q металлические свойства сохраняются, однако число электронов в верхней частично заполненной зоне порядка N/q , где N – общее число свободных электронов в металле. Обсуждаются также особенности эффекта де Гааза - Ван Альфена в сильном магнитном поле. Показано, что в интервале $0 \leq p/q \leq 1$ должно наблюдаться несколько серий осцилляций магнитной восприимчивости в области магнитных полей, соответствующих значениям p/q с малыми знаменателями q . Далее в п.2.2.2 исследуются квантовые состояния и поверхности Ферми для ориентации поля вдоль $(1, 1, 0)$ при $p/q = 1/2$. Для магнитного потока, близкого по значениям к $p/q = 1/2$, изучается образование магнитных подзон при энергиях, соответствующих открытым орбитам. В п.2.2.3 вычисляется полная энергия электронного газа при $\mathbf{H} \parallel (0, 0, 1)$ в характерных точках $p/q = 0, 1/4, 1/3, 1/2, 2/3, 3/4, 1$. Показано, что минимум достигается при $p/q = 1/2$. Последнее обстоятельство свидетельствует о том, что в сверхсильном магнитном поле (при указанной ориентации) одновалентный металл с ГЦК решёткой становится парамагнитным. Обсуждается также влияние уширения уровней Ландау на характер магнитных осцилляций.

В третьей главе изучаются квантовые состояния двумерного дырочного газа в присутствии магнитного поля и периодического потенциала квантовых точек. Учитываются эффекты, связанные со спин-орбитальным взаимодействием, что является принципиальным при описании дырок в полупроводниках. В п.3.1 проведен расчет магнитных подзон и четырехкомпонентных магнитных блоховских функций для дырок в гетеропереходе p -типа. Обнаружено, что структура дырочных магнитных подзон отличается от хорошо известной "бабочки" Хофштадтера, в особенности в сильных магнитных полях $p/q \gg 1$. Далее в п.3.2 рассчитываются матричные элементы и интенсивности люминесценции для прямых оптических переходов между дырочными магнитными подзонами и электронами, связанными с донорами, которые расположены в монослое внутри области гетероперехода. Обнаружены и объяснены следующие эффекты: (а) интенсивность люминесценции, отвечающая переходам в разные магнитные подзоны, имеет существенно различную величину; (б) интенсивность переходов сильно зависит от поляризации испускаемого излучения. Полученные в третьей главе результаты могут быть использованы для экспериментального обнаружения и идентификации сложных спектров, состоящих из магнитных подзон.

В четвертой главе исследуется холловская проводимость двумерного дырочного газа, помещенного в периодическое поле сверхрешетки квантовых точек. В качестве метода исследования выбран метод анализа особенностей волновой функции в зависимости от квазиимпульса, впервые использованный Усовым [26] в задаче с простым параболичес-

ким законом дисперсии для одного уровня Ландау. В настоящей работе данный метод впервые обобщается на случай многокомпонентной дырочной волновой функции и нескольких сильно взаимодействующих уровней Ландау. Вначале в п.4.1 рассмотрены топологические свойства нулей различных компонент дырочной пси-функции в координатном пространстве. Далее в п.4.2 вычислены топологические инварианты (классы Черна) для дырочных магнитных подзон, определяющие холловскую проводимость. Показано, что изменение холловской проводимости может быть обусловлено таким увеличением амплитуды периодического потенциала, при котором система подзон проходит через критические точки, отвечающие касаниям законов дисперсии. Предсказанные в четвёртой главе эффекты представляются доступными для наблюдения в экспериментах по транспорту в двумерных структурах.

В Заключение сформулированы выводы, сделанные по результатам работы.

Работа выполнена на кафедре теоретической физики физического факультета Нижегородского государственного университета им. Н.И. Лобачевского.

Глава 1

Квантовые состояния и холловская проводимость блоховских электронов в магнитном поле.

Спектр и магнитооптика

двумерного дырочного газа (обзор)

Если в отсутствие магнитного поля эволюция частицы с зарядом e описывалась гамильтонианом $H(\mathbf{p})$, где \mathbf{p} - импульс, то при наличии постоянного магнитного поля с векторным потенциалом \mathbf{A} гамильтониан будет функцией уже не \mathbf{p} , а $\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}$. При рассмотрении задачи о квантовых состояниях частицы с массой m , на которую одновременно влияют и магнитное поле $\mathbf{B} = \text{rot}\mathbf{A}$, и периодический электрический потенциал $V(\mathbf{r})$, гамильтониан представляет собой сумму двух слагаемых:

$$H = \frac{(\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}(\mathbf{r}))^2}{2m} + V(\mathbf{r}). \quad (1.1)$$

Необходимо сразу отметить, что в случае однородного постоянного магнитного поля \mathbf{B} и периодического электрического потенциала $V(\mathbf{r})$

два слагаемых гамильтониана (1.1) ведут себя по-разному при увеличении модуля \mathbf{r} :

$$|\mathbf{A}(\mathbf{r})| \rightarrow \infty, \quad |V(\mathbf{r})| < \infty \quad \text{при} \quad r \rightarrow \infty. \quad (1.2)$$

Такое поведение слагаемых гамильтониана делает затруднительным решение задачи о блоховском электроны в магнитном поле в общем виде. Поэтому для нахождения квантовых состояний, описываемых гамильтонианами типа (1.1), были разработаны различные приближённые методы. Схематически, области их применимости характеризуются следующими неравенствами:

$$\hbar\omega_c \ll V_0 - \text{подстановка Пайерлса}, \quad (1.3)$$

$$\hbar\omega_c \gg V_0 - \text{метод слабой связи}. \quad (1.4)$$

Здесь $\hbar\omega_c$ обозначает характерную энергию в магнитном поле, а V_0 - амплитуду периодического потенциала. В настоящей главе вначале мы рассмотрим метод подстановки Пайерлса. Далее мы обсудим основные принципы метода слабой связи, где рассматриваются возмущения уровней Ландау внешним периодическим потенциалом. Но предварительно нам необходимо рассмотреть вопрос, касающийся общих свойств блоховских состояний в магнитном поле, и прежде всего их поведение при трансляциях. Дело в том, что характер преобразования функции при трансляциях в магнитном поле во многом определяет свойства самой функции, область значений её квантовых чисел (магнитную зону Бриллюэна), и многое другое. Поэтому мы начнём обзор имеющихся результатов с обсуждения трансляционных свойств блоховских электронов в магнитном поле.

1.1 Магнитные трансляции и магнитная ячейка

1.1.1 Общие свойства трансляций в магнитном поле

Предварительно необходимо определить закон преобразования собственных волновых функций в магнитном поле, а также форму магнитной зоны Бриллюэна. Мы сделаем это, следуя в основном работам [6, 7], а также [66], однако здесь будет удобно воспользоваться калибровкой Ландау. Пусть магнитное поле \mathbf{B} направлено вдоль некоторой трансляции \mathbf{a}_3 . Выберем декартову систему координат (x_1, x_2, x_3) так, чтобы одна из осей (обозначим её x_3) была направлена вдоль магнитного поля, а две другие лежали в плоскости, перпендикулярной \mathbf{B} . Закон преобразования волновой функции при трансляциях зависит от калибровки векторного потенциала; выберем его в виде

$$\mathbf{A} = (0, Bx_1, 0). \quad (1.5)$$

Пусть $\psi(\mathbf{r})$ – некоторая собственная функция гамильтониана $\hat{H}(\mathbf{r})$. При трансляции $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + \mathbf{a}$ (\mathbf{a} – какой-либо из периодов решётки) эта функция перейдёт в $\psi(\mathbf{r} + \mathbf{a})$, однако это будет уже собственная функция гамильтониана $\hat{H}(\mathbf{r} + \mathbf{a})$, не совпадающего с $\hat{H}(\mathbf{r})$, поскольку произошла замена векторного потенциала

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) \rightarrow \mathbf{A}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = \mathbf{A}(\mathbf{r}) + Ba_1 \mathbf{n}_2. \quad (1.6)$$

Здесь \mathbf{a} имеет проекции (a_1, a_2, a_3) в декартовой системе координат (x_1, x_2, x_3) . Для того, чтобы получить собственную функцию $\hat{H}(\mathbf{r})$, надо вернуться к исходному гамильтониану, что достигается калибровочным преобразованием

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A} + \nabla f, \quad f = -Ba_1 x_2, \quad (1.7)$$

при котором волновая функция приобретает дополнительный фазовый множитель

$$\psi \longrightarrow \psi \exp(ief/\hbar c). \quad (1.8)$$

Обозначив результат всех операций как $\hat{T}_{\mathbf{a}}\psi(\mathbf{r})$, определим оператор магнитных трансляций

$$\hat{T}_{\mathbf{a}}\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r} + \mathbf{a}) \exp(iha_1x_2), \quad (1.9)$$

где $\mathbf{h} = |e|\mathbf{B}/\hbar c$. Как известно [66], введённый оператор $\hat{T}_{\mathbf{a}}$ может быть назван оператором трансляции в магнитном поле.

Из определения (1.9) следует, что при двух последовательных трансляциях на \mathbf{a} и \mathbf{a}' имеем

$$\hat{T}_{\mathbf{a}}\hat{T}_{\mathbf{a}'} = \hat{T}_{\mathbf{a}+\mathbf{a}'}\omega(\mathbf{a}, \mathbf{a}'), \quad \omega(\mathbf{a}, \mathbf{a}') = \exp(-iha'_1a_2), \quad (1.10)$$

а, следовательно, операторы $\hat{T}_{\mathbf{a}}$ и $\hat{T}_{\mathbf{a}'}$, вообще говоря, не коммутативны:

$$\hat{T}_{\mathbf{a}}\hat{T}_{\mathbf{a}'} = \hat{T}_{\mathbf{a}'}\hat{T}_{\mathbf{a}} \exp(-2iha'_1a_2) \quad (1.11)$$

и осуществляют не обычное, а проективное представление группы трансляций. Базисом этих представлений являются волновые функции стационарных состояний блоховского электрона в магнитном поле. Очевидно, что представление будет не проективным, а обычным, если в (1.10) выполнено условие $\omega(\mathbf{a}, \mathbf{a}') = 1$. Соответственно трансляции, для которых это условие выполнено, образуют группу магнитных трансляций, которые обеспечивают блоховский закон преобразования волновой функции. Будем отличать эти трансляции с помощью индекса m : $\mathbf{a}_m = (a_{1m}, a_{2m}, a_{3m})$. Из (1.10) следует, что трансляции являются магнитными, если выполнено условие

$$ha_{1m}a'_{2m} = 2\pi \frac{Ba_{1m}a'_{2m}}{\Phi_0} = 2\pi p, \quad p = 1, 2, 3, \dots \quad (1.12)$$

т.е. магнитный поток через площадь $a_{1m}a'_{2m}$ равен целому числу квантов потока $\Phi_0 = 2\pi\hbar c/|e|$. В формуле (1.12) a_{1m} и a'_{2m} – это проекции двух векторов \mathbf{a}_m и \mathbf{a}'_m , осуществляющих магнитные трансляции, на оси x_1 и x_2 . В кристалле с элементарной ячейкой, построенной на некопланарных кратчайших трансляциях \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 , а также $\mathbf{a}_3 \parallel \mathbf{B}$, условие (1.12) будет выполнено в магнитном поле, удовлетворяющем условию

$$\frac{Ba_{1x_1}a_{2x_2}}{\Phi_0} = \frac{p}{q}, \quad (1.13)$$

где a_{1x_1} и a_{2x_2} – проекции базовых векторов \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 соответственно на x_1 и x_2 , а q – целое число. При этом, согласно (1.12) и (1.13), векторы \mathbf{a}_m и \mathbf{a}'_m должны быть выбраны так, чтобы $a_{1m}a'_{2m} = qa_{1x_1}a_{2x_2}$. Условие (1.12), таким образом, определяет не весь вектор магнитной трансляции, а лишь его проекции на оси x_1 и x_2 , лежащие в плоскости, перпендикулярной \mathbf{H} . Поэтому магнитную ячейку в 3D пространстве кристалла можно выбрать по-разному. Для её оптимального выбора можно воспользоваться принципами, схожими с теми, которые используются при выводе решёток Браве: при выполнении условия (1.12) симметрия магнитной ячейки должна соответствовать симметрии всей решётки, число прямых углов и равных сторон должно быть максимальным, объём магнитной ячейки должен быть минимален.

1.1.2 Пример: магнитные трансляции в плоской квадратной решетке

Наиболее простой вид магнитные трансляции принимают в задаче о двумерном блоховском электроны, помещенном в перпендикулярное магнитное поле. Исторически (см. пп.1.2-1.3) именно эта задача о бло-

ховском электро́не в магнитном поле была рассмотрена первой, и в наши дни значительная часть экспериментов выполняется именно на 2D структурах с простой, прежде всего квадратной геометрией. В третьей и четвёртой главе диссертации будут обсуждаться квантовые состояния, оптика и транспорт в 2D дырочном газе, модулированном потенциалом квадратной сверхрешётки. Поэтому мы остановимся на вопросе о магнитных трансляциях на такой решётке более подробно.

Пусть квадратная решётка со стороной a расположена в плоскости (xy) и помещена в однородное магнитное поле B , направленное по оси z . Всюду в диссертации, кроме двух параграфов второй главы, где магнитное поле имеет ориентацию $(1, 1, 0)$, мы будем использовать следующую форму калибровки Ландау (1.5):

$$\mathbf{A} = (0, Bx, 0), \quad (1.14)$$

предполагая, что магнитный поток $\Phi = Ba^2$ равен рациональному числу p/q квантов магнитного потока Φ_0 . Тогда, согласно сказанному в заключительном абзаце предыдущего пункта и формуле (1.13), наиболее простыми будут магнитные трансляции вида

$$x \rightarrow x + qna, \quad y \rightarrow y + ta \quad (1.15)$$

где n и t – целые числа. Из формулы (1.15) следует, что квадратная элементарная ячейка в присутствии магнитного поля (называемая теперь магнитной элементарной ячейкой) удлиняется в направлении оси x в q раз и имеет вид

$$-qa \leq x \leq qa, \quad -a \leq y \leq a, \quad (1.16)$$

а соответствующая ей магнитная зона Бриллюэна (МЗБ) записывается как

$$-\pi/qa \leq k_x \leq \pi/qa, \quad -\pi/a \leq k_y \leq \pi/a. \quad (1.17)$$

Согласно (1.9), волновая функция приобретает при трансляции в магнитном поле дополнительный фазовый множитель. Связь между исходной и транслированной функциями дается обобщёнными условиями Блоха, называемыми также условиями Пайерлса: [65, 66]

$$\begin{aligned} \psi_{k_x k_y}(x, y, z) = \psi_{k_x k_y}(x + qa, y + a, z) \exp(-ik_x qa) \times \\ \times \exp(-ik_y a) \exp(-2\pi i r y/a). \end{aligned} \quad (1.18)$$

Из уравнения (1.18) следует, что при обходе в положительном направлении границы элементарной магнитной ячейки (1.16) волновая функция приобретает фазу $2\pi r$. Этот факт можно интерпретировать в терминах топологии векторных полей на плоскости [25], где с указанным набегом фазы связывается циркуляция векторного поля $\psi = (Re\psi, Im\psi)$ в плоскости (xy) , равная $-r$. Отсюда можно сделать вывод, что в магнитном поле, отвечающем r квантам потока на магнитную элементарную ячейку (1.16), у волновой функции приходится по крайней мере r нулей на такую ячейку. Указанное свойство имеет топологическую природу и будет обсуждаться подробнее в четвёртой главе диссертации в связи с изучением квантового эффекта Холла.

1.2 Магнитные блоховские состояния в методе сильной связи

1.2.1 Уравнение Харпера и ”бабочка” Хофштадтера

Как мы упоминали выше, введение магнитного поля заключается в переходе от импульса \mathbf{p} в гамильтониане к комбинации $\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}$. Если магнитное поле не очень велико, т.е. выполнено условие (1.3), то можно ожидать, что область значений в законе дисперсии $\varepsilon(\mathbf{k})$ при нулевом магнитном поле (т.е. ширина энергетической зоны) изменится незначительно, и влиянием соседних зон можно будет пренебречь. Это привело Р. Пайерлса в 1933 году [65, 66] к идее о подстановке комбинации $\mathbf{p} - \frac{e}{c}\mathbf{A}$ не в гамильтониан, а в выражение $\varepsilon(\mathbf{k})$ для закона дисперсии в нулевом магнитном поле, который теперь играет роль гамильтониана задачи:

$$\varepsilon(\mathbf{k}) \rightarrow \hat{\varepsilon} \left(\hat{\mathbf{k}} - \frac{e}{\hbar c} \hat{\mathbf{A}} \right). \quad (1.19)$$

Подстановка (1.19) известна как подстановка Пайерлса. Её можно применять к самым разнообразным законам дисперсии, но наиболее простым является приближение ближайших соседей в методе сильной связи для двумерного электрона на квадратной решётке. Закон дисперсии в этом случае имеет вид (решётка с периодом a лежит в плоскости (xy)):

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = -2E_0(\cos k_x a + \cos k_y a), \quad (1.20)$$

где E_0 есть интеграл перекрытия атомных функций на соседних узлах решётки. Если в выражении (1.20) выполнить подстановку Пайерлса (1.19), то мы получим оператор, содержащий сдвиги в направлении x

и y , поскольку $\hat{\mathbf{k}} = -i\nabla$, а

$$2 \cos \left(-ia \frac{\partial}{\partial x} \right) = \hat{T}(x+a) + \hat{T}(x-a), \quad (1.21)$$

где $\hat{T}(x \pm a)$ обозначает трансляцию по x на a , и аналогично для y . Предположим теперь, что амплитуда магнитного поля соответствует рациональному числу квантов потока p/q , т.е. можно говорить о существовании магнитных трансляций. Если теперь выбрать для векторного потенциала калибровку Ландау (1.14), и учесть, что волновая функция должна удовлетворять граничным условиям Пайерлса (1.18), то будет возможным свести задачу к одномерной, представив волновую функцию на узле с индексами (n, m) в виде

$$\psi_{nm} = e^{ik_x na + ik_y ma} g_n, \quad g_n = g_{n+q}, \quad (1.22)$$

где периодическая в пространстве амплитуда g_n характеризуется квантовыми числами (k_x, k_y) , изменяющимися в магнитной зоне Бриллюэна (1.17). Для коэффициентов g_n волновой функции (1.22) подстановка Пайерлса (1.19) в закон дисперсии (1.20) даёт уравнение, впервые полученное П. Харпером в 1955 году и широко известное ныне как уравнение Харпера [1, 2]:

$$e^{ik_x a} g_{n+1} + e^{-ik_x a} g_{n-1} + 2 \cos \left(2\pi \frac{p}{q} n + k_y a \right) g_n = \varepsilon g_n, \quad (1.23)$$

где энергия $\varepsilon(k_x, k_y)$ измеряется в единицах $-E_0$. Поскольку $g_{n+q} = g_n$, (1.23) представляет собой систему q разностных уравнений, которой можно сопоставить трёхдиагональную эрмитову матрицу $q \times q$ с дополнительными элементами в противоположных углах $(1, q)$ и $(q, 1)$. Несмотря на то, что система (1.23) записана для простейшей двумерной

решётки, уравнения типа (1.23) возникают при описании магнитных блоховских состояний в самых различных структурах, в том числе и в трёхмерных кристаллах, что будет рассматриваться во второй главе диссертации. Следует отметить, что подстановка Пайерлса (1.19) может быть обоснована, строго говоря, лишь для не очень больших магнитных полей, когда отбрасываются члены, содержащие само постоянное магнитное поле, а не только возрастающий при $r \rightarrow \infty$ векторный потенциал [66]. Учёт членов с \mathbf{V} должен производиться дополнительно. В связи с этим в главе 2 диссертации мы не будем использовать непосредственно подстановку (1.19), а применим метод линейной комбинации атомных орбит (метод сильной связи) в присутствии магнитного поля. Такой подход позволяет последовательно и физически обоснованно оценить эффекты, не учитываемые подстановкой (1.19). В частности, в п.2.2.1 будет оцениваться влияние магнитного поля на атомные волновые функции.

Вернёмся к системе (1.23). Поскольку размер матрицы системы (1.23) есть $q \times q$, то спектр, формирующийся на месте исходной зоны, состоит из q подзон, называемых магнитными подзонами. При плавном изменении магнитного поля числитель и знаменатель дроби p/q , через которую магнитное поле входит в (1.23), меняются очень резко. Поэтому визуализация спектра уравнения Харпера (1.23) долгое время доставляла значительные трудности, поскольку требовалась диагонализация матриц довольно большого размера при одновременном изменении двух параметров k_x и k_y . Относительно простой метод, позволивший провести диагонализацию (1.23) при максимальном значении

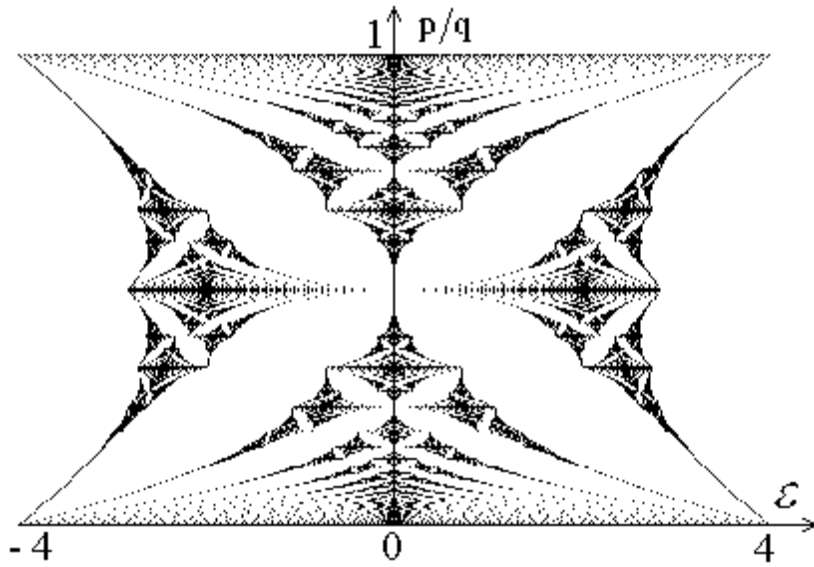


Рис. 1.1: "Бабочка" Хофштадтера: спектр уравнения Харпера (1.23) в квадратной решётке [8]. По оси абсцисс отложена энергия в единицах интеграла перекрытия, по оси ординат - число квантов магнитного потока через элементарную ячейку. Тёмные участки отвечают разрешённым значениям энергии, максимальное число показанных магнитных подзон $q_{max} = 50$.

$q_{max} = 50$, был предложен в 1976 году Д. Хофштадтером [8]. Спектр системы (1.23) в переменных "энергия"-"магнитный поток", который в силу своего внешнего сходства носит название "бабочки" Хофштадтера, показан на рис. 1.1.

Если же число квантов потока иррационально, то спектр системы (1.23) состоит из бесконечного числа бесконечно узких подзон, т.е. имеет характер канторовского множества. Следует отметить, что многие свойства блоховского электрона в магнитном поле были предсказаны до появления графика 1.1, в частности, в работах [3, 4, 5, 52, 53, 54, 55, 30]. Например, группирование узких магнитных подзон возле широких, отвечающее значению дроби $p/q = p_1/q_1 + 1/q_2$, где p_1 и q_1 образуют простое рациональное число с $q_1 = 2, 3, \dots$, а $q_2 \gg 1$, были предска-

заны задолго до появления графика 1.1 Азбелем в 1964 году [5]. Но и после работы Хофштадтера аналитическое исследование системы (1.23) не прекращалось. Наибольшим вниманием пользовался вопрос о таких свойствах квантовых состояний, которые не зависят от приближения для магнитного потока в виде дроби. В этой связи можно отметить работу Ванье с сотрудниками [56], а также обзор Хирамото и Комото 1992 года [57]. После работы Хофштадтера были получены спектры типа "бабочки" для различных двумерных решёток, например, с гексагональной [27, 58] и треугольной [58] симметриями. В последние годы были изучены магнитные блоховские состояния в более сложных решётках, в том числе без центра инверсии [59]. Изучалось также влияние различных факторов "неидеальности" на спектр (1.1). Так, сам Хофштадтер [8] затронул вопрос о влиянии ненулевой температуры, которая приводит к уширению магнитных подзон и к размытию тонкой структуры спектра. Последнее обстоятельство, кстати, оправдывает ограничение в представлении магнитного потока конечной дробью даже в случае иррационального числа его квантов. В самом деле, представляя иррациональное число бесконечной дробью, мы будем получать, согласно Азбелю [5], последовательности всё более узких подзон, которые будут группироваться около широких. Конечная температура приведёт к температурному размытию всей "тонкой" составляющей спектра, и можно установить, например, прямым численным расчётом, дробью с каким знаменателем можно ограничиться при данной температуре.

Несмотря на то, что в большинстве работ о блоховских электронах в магнитном поле используется одночастичное приближение, многочастичные эффекты также принимались во внимание. Так, в работе

До и Сак-Салка 1998 г. [60] проводился расчёт влияния кулоновского взаимодействия между 2D электронами на спектр типа ”бабочки” Хофштадтера. Авторами этой работы для записи гамильтониана задачи использовалась однозонная модель Хаббарда:

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle \sigma} t_{ij} C_{i\sigma}^\dagger C_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_{i\sigma} C_{i\sigma}^\dagger C_{i\sigma}, \quad (1.24)$$

где t_{ij} есть интеграл перекрытия (с амплитудой t) между узлами решётки с координатами $i = (i_x, i_y)$ и $j = (j_x, j_y)$ в присутствии магнитного поля, $C_{i\sigma}^\dagger$ ($C_{i\sigma}$) обозначают операторы рождения (уничтожения) частицы со спином σ на узле i , величина U представляет собой амплитуду кулоновского отталкивания, n_i есть число заполнения на узле i , а через μ обозначен химический потенциал. Скобки $\langle ij \rangle$ в (1.24) означают, что суммирование идёт только по ближайшим узлам j к узлу i . Авторами работы [60] было показано, что гамильтониану (1.24) отвечает система двух связанных разностных уравнений типа уравнения Харпера. Наличие двух связанных уравнений обусловлено взаимодействием между электронами, имеющим характер антиферромагнитных корреляций [60]. В результате расчётов спектр системы (1.24) $\varepsilon(\mathbf{k}) = E(\mathbf{k})/t$ следующим образом выражается через закон дисперсии $\varepsilon_0(\mathbf{k})$ для не взаимодействующих электронов, т.е. через спектр для ”классической бабочки” Хофштадтера:

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = \frac{U}{2t}(1 - \delta) - \frac{\mu}{t} \pm \sqrt{\varepsilon_0^2(\mathbf{k}) + \left(\frac{\Delta}{2}\right)^2}, \quad (1.25)$$

где $\delta = \delta_i = 1 - \sum_{\sigma} \langle C_{i\sigma}^\dagger C_{i\sigma} \rangle$ представляет собой число свободных состояний на узле i , которое в приближении среднего поля принимается в работе [60] за постоянную величину δ . Энергетическая щель $\Delta = mU/t$, где m есть намагниченность на узлах решётки, которая, как и δ , принимается равной константе.

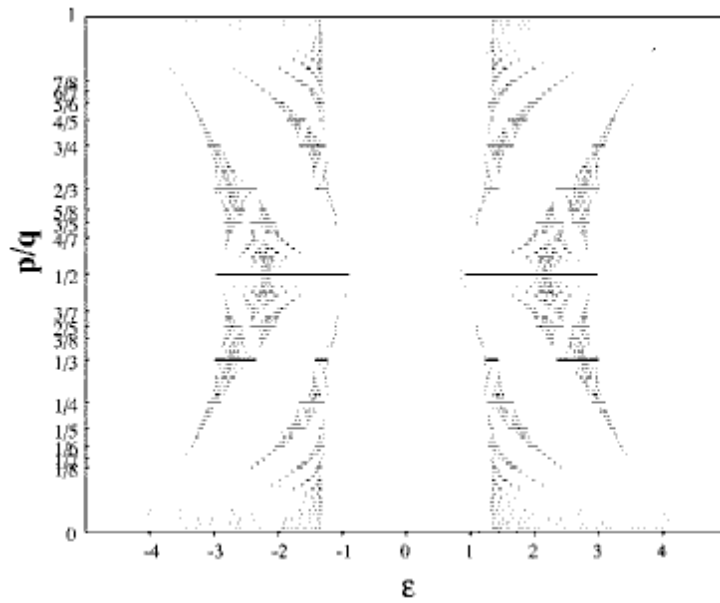


Рис. 1.2: "Бабочка" Хофштадтера с учётом кулоновского отталкивания между электронами [60]. Амплитуда отталкивания U в четыре раза превышает амплитуду интеграла перекрытия t в гамильтониане (1.24). Видна образовавшаяся щель в спектре и сохранившаяся фрактальная структура "бабочки".

Закон дисперсии (1.25) как функция магнитного потока показан на рис.1.2 для случая сильного кулоновского отталкивания $U = 4t$, т.е. когда амплитуда отталкивания вчетверо превышает амплитуду интеграла перекрытия. Анализируя структуру спектра на рис.1.2, вслед за авторами работы [60] можно сделать вывод, что учёт кулоновского отталкивания приводит к образованию щели в спектре, но не изменяет качественные свойства "бабочки" Хофштадтера. Именно, сохраняется существование магнитных подзон для рационального потока, а также схема их группирования. Для поставленных в настоящей работе задач именно эти свойства являются определяющими. Поэтому далее в диссертации мы будем оставаться в рамках одночастичного приближения.

1.2.2 Трёхмерные задачи

Проблема квантовых состояний в 3D кристаллах, находящихся в сильном магнитном поле, также была объектом исследования. В работе [31] было показано, что в простой кубической решётке при ориентации поля вдоль $(0, 0, 1)$ при переходе от 2D к 3D спектру происходит простое уширение магнитных зон. При наклонной ориентации поля в трёхмерной анизотропной решётке в работе [63] было обнаружено дробное квантование холловской проводимости, возникающее при положении вектора \mathbf{B} в плоскости (yz) . Полная энергия электронов и плотность состояний для некоторых ориентаций поля $((0, 0, 1), (0, 1, 1), (1, 1, 1))$ в простой кубической решётке была вычислена в работе [32], причём в некоторых случаях было обнаружено не увеличение, а уменьшение полной энергии электронов в магнитном поле. Эти расчёты были развиты для произвольной ориентации поля в простой кубической решётке в работе [33], где также была вычислена полная энергия электронов и плотность состояний, причём вновь было обнаружено снижение полной энергии в присутствии магнитного поля. Наконец, в недавней статье 2001 года [34] рассматривался энергетический спектр типа "бабочки" Хофштадтера и целочисленное квантование холловской проводимости в трёхмерной решётке. Упомянутые в данном пункте работы послужили стимулом к изучению магнитных блоховских состояний в трёхмерных кристаллических решётках реальных металлов, что составляет содержание второй главы диссертации.

1.3 Метод слабой связи для электрона с параболическим законом дисперсии в магнитном поле

Если амплитуда периодического потенциала V_0 меньше, чем циклотронная энергия $\hbar\omega_c$, то можно пренебречь влиянием соседних уровней Ландау. В результате спектр будет представлять из себя систему магнитных подзон, на которые расщепляется один уровень Ландау. Следуя известной работе Таулесса, Комото, Найтингейла и Ден Нижса [9], запишем волновую функцию блоховского электрона для N -го расщеплённого уровня Ландау в следующем виде:

$$\begin{aligned} \psi_{k_x k_y}(\mathbf{r}) = & \sum_{n=1}^p d_n \sum_{l=-\infty}^{\infty} u_N \left(\frac{x - x_0 - lqa - nqa/p}{\ell_H} \right) \times \\ & \times \exp \left(ik_x \left[lqa + \frac{nqa}{p} \right] \right) \exp \left(2\pi i y \frac{lp + n}{a} \right) \exp(ik_y y) \end{aligned} \quad (1.26)$$

где $\ell_H = \sqrt{\hbar c / eH}$ обозначает магнитную длину, $x_0 = k_y \ell_H^2$, $u_N(x)$ есть N -я функция гармонического осциллятора. Анализируя структуру функции (1.26), можно заметить, что она представляет собой линейную комбинацию p квантовых состояний N -го уровня Ландау, расположенных в разных точках координатного пространства и характеризующихся амплитудами d_n , которые подлежат определению. В работе [9] рассматривалась простейшая форма периодического потенциала, имеющая вид суммы двух косинусов, т.е.

$$V(x, y) = U_1 \cos \frac{2\pi x}{a} + U_2 \cos \frac{2\pi y}{a}. \quad (1.27)$$

По форме этот потенциал напоминает исходный закон дисперсии (1.20) в методе сильной связи, рассмотренном в предыдущем параграфе. Тог-

да мы пришли к уравнению Харпера на коэффициенты g_n . Не удивительно, что и в методе слабой связи с потенциалом (1.27) для коэффициентов d_n получается уравнение, сходное по форме с уравнением Харпера:

$$V_2 \exp\left(ik_x a \frac{q}{p}\right) d_{n+1} + V_2 \exp\left(-ik_x a \frac{q}{p}\right) d_{n-1} + 2V_1 \cos\left(k_y a \frac{q}{p} + 2\pi n \frac{q}{p}\right) d_n = \varepsilon d_n, \quad (1.28)$$

где $V_1 \sim U_1$, $V_2 \sim U_2$ и $d_{n+p} = d_n$, а компоненты квазиимпульса (k_x, k_y) изменяются в пределах магнитной зоны Бриллюэна (1.17). По форме уравнение (1.28) напоминает уравнение Харпера (1.22), однако что из него исключена циклотронная энергия $\hbar\omega_c$, а магнитное поле представлено во всех слагаемых левой части в виде обратной величины магнитного потока q/p . Кроме этого, общая величина расщепления уровня Ландау напрямую связана с амплитудами периодического потенциала $V_{1,2}$, а также с N -м полиномом Лагерра L_N (см. ниже). Соответственно, спектр системы (1.28) при $V_1 = V_2$ представляет собой ту же ”бабочку” Хофштадтера, что и на рис. 1.1 для метода сильной связи. Мы не обсуждаем здесь подробно вопросы, связанные с эффектами анизотропии потенциала, когда $V_1 \neq V_2$ (за исключением примера расчёта холловской проводимости в п.1.5), которые описаны, например, в работах [63, 62, 57], а также с потенциалами решётки без центра инверсии [59]. Несмотря на то, что величина магнитного поля представлена в уравнениях (1.23) и (1.28) в виде дроби p/q (или q/p), необходимо отметить, что параметры p и q самостоятельно определяют ряд физических величин. Так, как уже было отмечено выше, каждый уровень Ландау расщепляется на p подзон, кратность вырождения каждой из которых, определяющая размер магнитной зоны Бриллюэна, равна q .

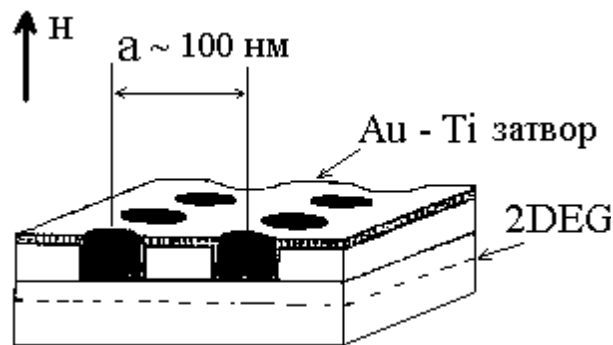


Рис. 1.3: Гетеропереход AlGaAs-GaAs, модулированный периодическим потенциалом сверхрешётки. Через 2DEG обозначено место формирования двумерного электронного газа, вектор \mathbf{H} показывает направление магнитного поля. Электростатический потенциал металлического затвора управляет поверхностной концентрацией электронов.

Простейший вид периодического потенциала (1.27) использовался и в других работах, например, в [85, 89, 58, 12]. При этом, однако, выяснилось, что он не соответствует потенциалу реальных сверхрешёток, которые стали использоваться в экспериментах с блоховскими электронами в магнитном поле, начиная с работы Д. Вейсса 1991 года [16], и далее в других публикациях [17, 110, 18, 19, 22, 111, 20]. Схема одного из экспериментально изучаемых образцов [16, 61] представлена на рис. 1.3.

Необходимо отметить, что принципиальная схема структуры, показанной на рис. 1.3, остаётся неизменной и при изучении двумерного дырочного газа, модулированного периодическим потенциалом и помещённого в магнитном поле. Эксперименты по транспорту в такой системе начались лишь в 2002 году в группе Д. Вейсса [21], а теоретическое исследование составляет третью (квантовые состояния) и четвёртую (квантовый эффект Холла) главы настоящей диссертации.

Потенциал, создаваемый сверхрешёткой, схема которой показана на рис. 1.3, в общем случае является сложной функцией, зависящей от относительного размера сфабрикованных методом литографии ”квантовых точек” [16, 17, 110, 22, 111]. Известно лишь, что потенциал решётки $V(x, y)$ периодичен в двух направлениях. Последующие расчёты, однако, показывают, что для выяснения характера расщепления уровней Ландау на подзоны достаточно рассмотреть простейшую периодическую зависимость для потенциала сверхрешётки, которую мы, следуя [12, 13, 14] примем в следующем виде:

$$V(x, y) = V_0 \cos^2 \frac{\pi x}{a} \cos^2 \frac{\pi y}{a}. \quad (1.29)$$

Здесь a обозначает период сверхрешётки, типичный значение которого в экспериментах составляет ~ 100 нм, а в настоящей работе принимается равным 80 нм. Знак амплитуды потенциала $V_0 < 0$ (> 0) соответствует случаю квантовых точек (антиточек). Этот знак, равно как и величина потенциала, являются экспериментально задаваемыми параметрами. В последних экспериментах группы К. фон Клитцинга, Д. Вейсса и др. [20, 21] были продемонстрированы возможности проводить эксперимент при уменьшении амплитуды V_0 до 0.6 мэВ (при соответственно низкой температуре, не превышающей $|V_0|$), что позволяет сделать вывод о возможности экспериментальной проверки эффектов, обсуждаемых в диссертации. Ввиду того, что основой для изучения многокомпонентных магнитных блоховских функций является задача об однокомпонентных состояниях блоховского электрона в магнитном поле, мы остановимся на последней более подробно. При изложении мы будем следовать в основном работам [13, 14] (см. также [11, 10, 12]).

Рассматривается окрестность Γ -точки в нижней зоне размерного квантования электронов в гетеропереходе n -типа GaAs/AlGaAs. В приближении огибающих функций квантовое состояние блоховского электрона можно представить как произведение атомной функции s -типа $s(\mathbf{r})$ и огибающей функции $\psi_{k_x k_y}(\mathbf{r})$:

$$\Psi_{k_x k_y}(\mathbf{r}) = \psi_{k_x k_y}(\mathbf{r})s(\mathbf{r}). \quad (1.30)$$

Функция $\psi_{k_x k_y}$, входящая в выражение (1.30), является объектом последующего изучения. Она представляет собой собственную функцию для гамильтониана частицы с эффективной массой m_{eff} , помещённой в однородное магнитное поле $\mathbf{B}||Oz$ и в периодическое электрическое поле сверхрешётки, находящейся в плоскости гетероперехода (xy) и описываемой потенциалом (1.29). Электронная волновая функция $\psi_{k_x k_y}$ должна удовлетворять условиям Пайерлса (1.18). Кроме этого, при достаточно больших амплитудах периодического потенциала (1.29), когда $V_0 \approx \hbar\omega_c$, необходимо учесть взаимодействие между несколькими уровнями Ландау N . Волновая функция, удовлетворяющая всем этим требованиям, может быть записана в следующей форме [10, 11, 12, 13, 14]:

$$\begin{aligned} \psi_{k_x k_y}(\mathbf{r}) = & \frac{1}{La\sqrt{q}} \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{n=1}^p C_{Nn}(k_x, k_y) \sum_{l=-L/2}^{L/2} u_N \left(\frac{x - x_0 - lqa - nqa/p}{\ell_H} \right) \times \\ & \times \exp \left(ik_x \left[lqa + \frac{nqa}{p} \right] \right) \exp \left(2\pi iy \frac{lp + n}{a} \right) \exp(ik_y y). \end{aligned} \quad (1.31)$$

Видно, что функция (1.31) по своей структуре является обобщением функции (1.26) на случай многих уровней Ландау. После подстановки функции (1.31) в уравнение Шрёдингера с периодическим потенциалом (1.29) и переходом к матричному уравнению получается система из $N_{max} \times p$ уравнений, где N_{max} есть число учитываемых уровней Ландау. Энергетический спектр $\varepsilon_{Nn}(k_x, k_y)$ образует систему p магнитных

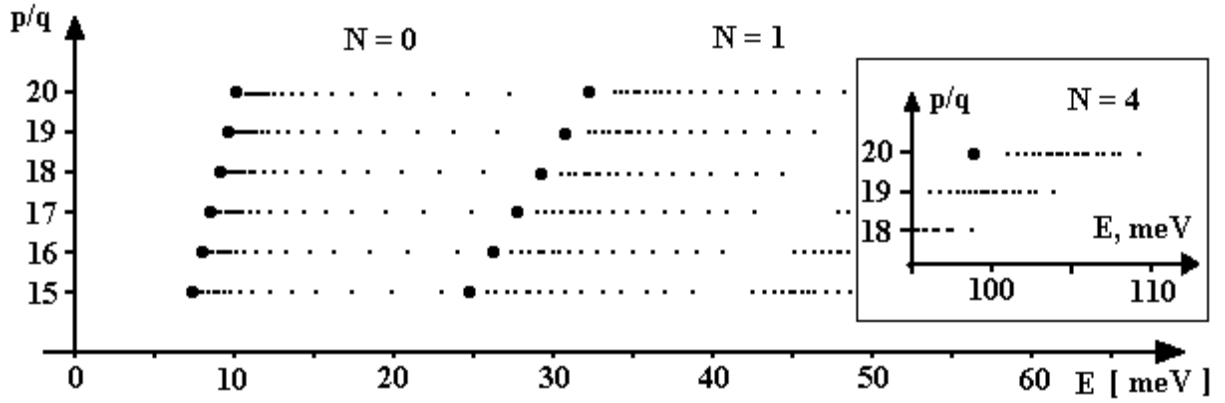


Рис. 1.4: Электронный спектр как функция магнитного потока p/q в решётке анти-точек с $a = 80$ нм и $V_0 = 20$ мэВ, показанный в области сильных магнитных полей $p/q \gg 1$. Изображены участки спектра, отвечающие уровням Ландау $N = 0$, $N = 1$, а также $N = 4$ (на вставке). Положения невозмущённых уровней Ландау отмечены чёрными кружками.

подзон ($n = 1, \dots, p$) для каждого уровня Ландау N . Фрагмент такого спектра в решётке антиточек с периодом $a = 80$ нм и амплитудой потенциала $V_0 = 20$ мэВ, показан для $k_x = k_y = 0$ на рис. 1.4 для трёх уровней Ландау $N = 0$, $N = 1$, и $N = 4$ на вставке.

Из рис.1.4 видно, что в сильных магнитных полях, когда $\hbar\omega_c > V_0$, магнитные подзоны очень узкие и выглядят почти как дискретные уровни, т.е. энергия в подзоне практически не зависит от k_x и k_y . Рассматривая структуру подзон, относящихся к различным уровням Ландау, можно заметить, что она зависит от номера уровня N . Именно, с увеличением N общая ширина расщепления уменьшается, а положение точки сгущения отодвигается от позиции невозмущённого уровня Ландау к центру системы подзон. Следует отметить, что вопрос об уширении уровней Ландау в периодическом потенциале начал изучаться ещё до появления "бабочки" Хофштадтера. Так, в работах Ро 1974-75 годов

[52, 53] (см. также [54, 55]) делались аналитические оценки такого уширения. Но наиболее показательные результаты стали появляться лишь с развитием численных методов, т.е. после работы Хофштадтера [8].

Представляется необходимым подчеркнуть различие между потенциалами вида (1.27) и (1.29). Последний имеет постоянный знак и не сводится к сумме двух гармоник, поэтому система магнитных подзон для него не похожа на "бабочку" Хофштадтера, даже если спектр на рис. 1.4 изобразить как функцию обратного магнитного потока q/p . Рассмотрим для простоты расщепление одного уровня N независимо от остальных. Тогда для потенциала квантовых точек (1.29) мы получим следующее уравнение на коэффициенты C_n :

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} e^{ik_x a \frac{q}{p}} \left[e^{-\frac{\pi q}{2p}} L_N \left(\frac{\pi q}{p} \right) + \cos \left(2\pi \frac{q}{p} \left[n + \frac{1}{2} \right] + k_y a \frac{q}{p} \right) e^{-\frac{\pi q}{p}} L_N \left(2\pi \frac{q}{p} \right) \right] C_{n+1} + \\ \frac{1}{2} e^{-ik_x a \frac{q}{p}} \left[e^{-\frac{\pi q}{2p}} L_N \left(\frac{\pi q}{p} \right) + \cos \left(2\pi \frac{q}{p} \left[n - \frac{1}{2} \right] + k_y a \frac{q}{p} \right) e^{-\frac{\pi q}{p}} L_N \left(2\pi \frac{q}{p} \right) \right] C_{n-1} + \\ + e^{-\frac{\pi q}{2p}} L_N \left(\frac{\pi q}{p} \right) \cos \left(2\pi n \frac{q}{p} + k_y a \frac{q}{p} \right) C_n = \varepsilon C_n \end{aligned} \quad (1.32)$$

где выполняется условие $C_{n+p} = C_n$ и, как и в (1.28), исключена циклотронная энергия $\hbar\omega_c$. Через L_N обозначен N -й полином Лагерра. Спектр системы (1.32) показан на рис. 1.5 для двух низших уровней Ландау $N = 0$ и $N = 1$ [11].

Представление спектра на рис. 1.5 как функции обратного магнитного потока q/p позволяет разместить на одном рисунке более полную информацию о структуре магнитных подзон по сравнению с рис. 1.4. При значениях $q/p \ll 1$ на рис. 1.5 виден спектр в сильных магнитных полях, тождественный по форме показанному на рис. 1.4, а при $q/p \approx 1$ (например, для $q/p = 1/4, 1/3, 1/2, 2/3, \dots$) на рис. 1.5 видны относительно широкие магнитные подзоны в слабых полях. Из сравне-

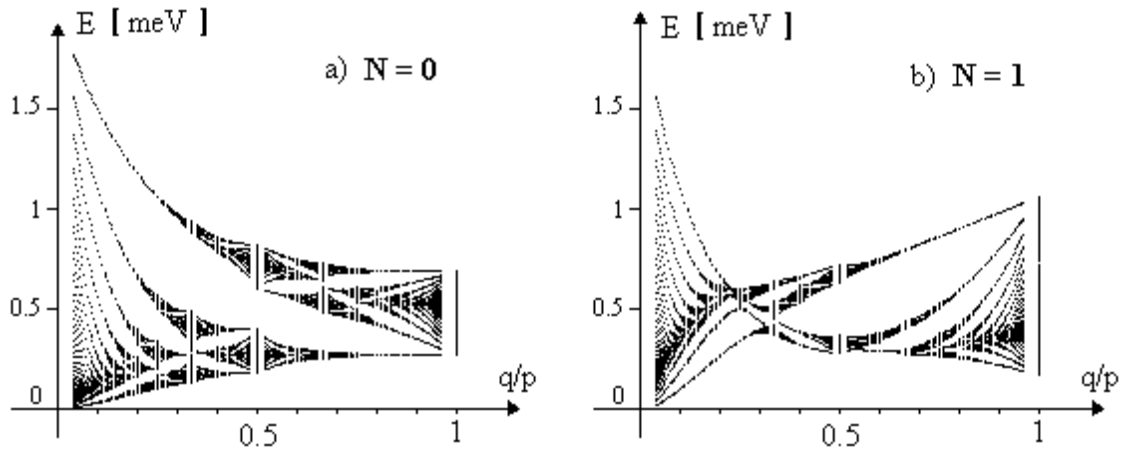


Рис. 1.5: Электронный спектр как функция обратного магнитного потока q/p в решётке антиточек с $a = 80$ нм и $V_0 = 2$ мэВ, показанный в приближении невзаимодействующих уровней Ландау $N = 0$ (a) и $N = 1$ (b).

ния рисунков 1.5 (a), (b) с "бабочкой" Хофштадтера на рис. 1.1 видно, что в промежуточном интервале магнитных полей $0.1 < q/p < 1$ полная ширина расщепления уровней Ландау варьируется, что связано с немонотонным поведением полиномов Лагерра в системе (1.32).

1.4 Квантовые состояния и магнитооптика дырок, описываемых гамильтонианом Латтинжера

1.4.1 Четырёхкомпонентные волновые функции и спектр 2D дырок в магнитном поле

Специфические черты дырочных квантовых состояний, обуславливающие интерес к ним, могут быть кратко охарактеризованы как нетривиальные эффекты, связанные с симметрией и спин-орбитальным взаимодействием. Известно, что в отсутствие магнитного поля электронный спектр в симметричной квантовой яме (обозначим направление ее гра-

ницы как z) является двукратно вырожденным по отношению к спину [76]. Напротив, в асимметричном гетеропереходе с $V(z) \neq V(-z)$ релятивистское орбитальное взаимодействие между магнитным моментом электрона и макроскопическим потенциалом гетероперехода приводит к снятию вырождения по спину. Остается лишь двукратное крамерсовское вырождение $E(\mathbf{k}, \uparrow) = E(-\mathbf{k}, \downarrow)$.

Рассмотрим верхний край валентной зоны в GaAs, в окрестности Γ_8 -точки при $\mathbf{k} = 0$. Его зонная структура в геометрии, когда ось z параллельна кристаллографическому направлению $\langle 001 \rangle$, описывается гамильтонианом Латтинжера [70, 71]. Для гетероструктуры GaAs/AlGaAs можно пренебречь линейными по \mathbf{k} членами в гамильтониане, приводящими к сдвигу максимума энергии в \mathbf{k} -пространстве, так как эти члены очень малы [73, 74]. Вслед за работой Бройдо и Шэма [71], наиболее употребительной является запись гамильтониана Латтинжера в переменных ($k_{\pm} = k_x \pm ik_y$, $k^2 = k_x^2 + k_y^2$, k_z). В атомных единицах, когда масса свободного электрона m_0 и \hbar равны единице, и в аксиальном приближении (зависимость только от k^2 и k_z) гамильтониан имеет вид:

$$H_L = \begin{bmatrix} H_h & \frac{\sqrt{3}}{2}\gamma k_-^2 & \sqrt{3}\gamma_3 k_z k_- & 0 \\ & H_l & 0 & -\sqrt{3}\gamma_3 k_z k_- \\ & & H_l & \frac{\sqrt{3}}{2}\gamma k_-^2 \\ & & & H_h \end{bmatrix}, \quad (1.33)$$

где нижний треугольник получается из верхнего эрмитовым сопряжением, а диагональные элементы

$$H_h = -(\gamma_1/2 - \gamma_2)k_z^2 - \frac{k^2}{2}(\gamma_1 + \gamma_2),$$

$$H_l = -(\gamma_1/2 + \gamma_2)k_z^2 - \frac{k^2}{2}(\gamma_1 - \gamma_2)$$

относятся к тяжелым и легким дыркам, соответственно. Энергия дырок отсчитывается в отрицательную область от края валентной зоны, который мы примем за начало координат. В (1.33) входят известные числовые параметры Латтинжера γ_1 , γ_2 , γ_3 и $\bar{\gamma} = (\gamma_2 + \gamma_3)/2$.

В присутствии внешнего магнитного поля $\mathbf{B}||z$ с векторным потенциалом \mathbf{A} гамильтониан \hat{H}_L может быть получен из гамильтониана Латтинжера (1.33) следующим образом. Компоненты волнового вектора заменяются их операторными выражениями:

$$k_\alpha \rightarrow \hat{k}_\alpha = -i\frac{\partial}{\partial x_\alpha} + \frac{e}{c}A_\alpha, \quad (1.34)$$

а на главную диагональ добавляются члены, описывающие взаимодействие спинового момента κ с внешним магнитным полем. Значение κ для данного материала берется из таблиц. Переходя к операторам рождения и уничтожения

$$\hat{a}^+ = \frac{R_c}{\sqrt{2}}\hat{k}_+, \quad \hat{a} = \frac{R_c}{\sqrt{2}}\hat{k}_- \quad (1.35)$$

где $R_c = [c/eB]^{1/2}$, мы получим из (1.33) следующую матрицу:

$$\hat{H}_L = \begin{bmatrix} \hat{H}_{11} & \bar{\gamma}\sqrt{3}(eB/c)\hat{a}^2 & \gamma_3\sqrt{6eB/c}k_z\hat{a} & 0 \\ & \hat{H}_{22} & 0 & -\gamma_3\sqrt{6eB/c}k_z\hat{a} \\ & & \hat{H}_{33} & \bar{\gamma}\sqrt{3}(eB/c)\hat{a}^2 \\ & & & \hat{H}_{44} \end{bmatrix}, \quad (1.36)$$

где

$$\begin{aligned} \hat{H}_{11} &= -(\gamma_1/2 - \gamma_2)k_z^2 - (eB/c) \left[(\gamma_1 + \gamma_2) \left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2} \right) + \frac{3}{2}\kappa \right], \\ \hat{H}_{22} &= -(\gamma_1/2 + \gamma_2)k_z^2 - (eB/c) \left[(\gamma_1 - \gamma_2) \left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2} \right) - \frac{1}{2}\kappa \right], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\hat{H}_{33} &= -(\gamma_1/2 + \gamma_2)k_z^2 - (eB/c) \left[(\gamma_1 - \gamma_2) \left(\hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2} \right) + \frac{1}{2} \kappa \right], \\ \hat{H}_{44} &= -(\gamma_1/2 - \gamma_2)k_z^2 - (eB/c) \left[(\gamma_1 + \gamma_2) \left(\hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2} \right) - \frac{3}{2} \kappa \right].\end{aligned}$$

Как и в (1.33), нижняя часть матрицы (1.36) получается из верхней эрмитовым сопряжением. Через e мы обозначаем модуль элементарного заряда, параметры Латтинжера далее принимаются равными [71]: $\gamma_1 = 6.85$, $\gamma_2 = 2.1$, $\gamma_3 = 2.9$, и $\kappa = 1.2$. Гамильтониан Латтинжера (1.36) записывается для огибающих, базисом которых являются атомные функции $v_j(\mathbf{r})$, являющиеся функциями p -типа и преобразующиеся как собственные функции оператора углового момента с числом $J = 3/2$. Функции данного $|J; m_J\rangle$ базиса имеют следующий вид:

$$\begin{cases} v_1 = |\frac{3}{2}; \frac{3}{2}\rangle = |-\sqrt{1/2}(x + iy) \uparrow\rangle, \\ v_2 = |\frac{3}{2}; -\frac{1}{2}\rangle = |-\sqrt{1/6}(x - iy) \uparrow - \sqrt{2/3}z \downarrow\rangle, \\ v_3 = |\frac{3}{2}; \frac{1}{2}\rangle = |\sqrt{1/6}(x + iy) \downarrow - \sqrt{2/3}z \uparrow\rangle, \\ v_4 = |\frac{3}{2}; -\frac{3}{2}\rangle = |-\sqrt{1/2}(x - iy) \downarrow\rangle, \end{cases} \quad (1.37)$$

где стрелки обозначают z -проекцию спина. Дырки в гетеропереходе GaAs/AlGaAs, выращенном в z -направлении, находятся в потенциале гетероперехода $V_h(z)$, который является плавно изменяющейся функцией. Это позволяет использовать при описании размерного квантования приближение эффективной массы $\hat{k}_z = -i\partial/\partial z$. Потенциал $V_h(z)$ имеет треугольный профиль, причем ввиду того, что разница в положениях края валентной зоны в GaAs и AlGaAs много больше, чем энергии размерного квантования дырок, границу гетероперехода можно считать непроницаемой, т.е. принять граничное условие $\psi(0) = 0$. Необходимо отметить, что треугольный профиль $V_h(z)$ не обладает центром ин-

версии, т.е. $V_h(z) \neq V_h(-z)$, что приводит к снятию двукратного вырождения по спину и к расщеплению уровней энергии эффективного гамильтониана

$$\hat{H}_{eff} = \hat{H}_L(\hat{a}^+, \hat{a}, k_z) + V_h(z) \cdot \hat{E} \quad (1.38)$$

даже в отсутствие магнитного поля [71]. Здесь и далее \hat{E} обозначает единичную матрицу 4×4 . Отсутствие центра симметрии у кристаллического потенциала GaAs имеет место также и в объемном материале, что описывается линейными по \mathbf{k} членами в гамильтониане. Однако, эффекты, производимые этими членами и заключающиеся в смещении максимума энергии в \mathbf{k} -пространстве, пренебрежимо малы по сравнению с влиянием потенциала гетероперехода и поэтому нами не рассматриваются.

Прежде всего можно видеть, что при $B = 0$ гамильтониан (1.38) становится диагональным с элементами

$$\begin{aligned} \hat{H}_h &= -(\gamma_1/2 - \gamma_2) \frac{d^2}{dz^2} + V_h(z), \\ \hat{H}_l &= -(\gamma_1/2 + \gamma_2) \frac{d^2}{dz^2} + V_h(z) \end{aligned} \quad (1.39)$$

что порождает бесконечную последовательность двукратно вырожденных уровней размерного квантования тяжелых и легких дырок, а также огибающих функций $c_{\nu_j}(z)$, $\nu = 1, 2, \dots$. Эти функции обычно находят, решая самосогласованно уравнения Шрёдингера и Пуассона. В результате профиль потенциала $V_h(z)$ имеет переменный градиент, отражающий изменения в напряженности электрического поля внутри гетероперехода [23, 71]. Как следствие, точный профиль огибающих $c_{\nu_j}(z)$ отличается от своей формы в постоянном электрическом поле. Однако,

принимая во внимание наши последующие цели, можно отметить, что необходимо знать лишь степень перекрытия между различными функциями $c_{\nu_j}(z)$, а также между ними и хорошо известными функциями донорных примесей. Интервалы локализации для $c_{\nu_j}(z)$ могут быть получены с высокой точностью для всех подзон размерного квантования, поскольку профиль потенциала в гетеропереходе GaAs/AlGaAs хорошо известен [71]. Как известно [71, 23, 75, 76], решение уравнения в методе эффективной массы с гамильтонианом (1.38) может быть записано как четырехкомпонентный вектор огибающих в $|J; m_J\rangle$ базисе (1.37). Как было показано Латтинжером [70], в присутствии магнитного поля и в аксиальном приближении собственные вектора оператора (1.36), а, значит, и (1.38), могут быть классифицированы единым квантовым числом N , определяющим конкретную совокупность дырочных функций Ландау. В калибровке Ландау (1.14) эти состояния имеют k_y компоненту квазиимпульса. Таким образом, собственный вектор F_{Nk_y} оператора (1.38) состоит из четырех огибающих функций, а дырочная волновая функция записывается как

$$\Psi_{Nk_y} = \sum_{j=1}^4 F_{jNk_y} v_j \quad (1.40)$$

где v_j – функция $|J; m_J\rangle$ базиса, а

$$F_{Nk_y}^\nu = e^{ik_y} (C_1^\nu(z)u_{N-2}, C_2^\nu(z)u_N, C_3^\nu(z)u_{N-1}, C_4^\nu(z)u_{N+1}). \quad (1.41)$$

В формуле (1.41) $u_N(x)$ обозначает функцию гармонического осциллятора, а огибающие $C_j^\nu(z)$ в ν -й подзоне размерного квантования строятся как суперпозиция функций $c_\nu(z)$ для нулевого магнитного поля, с численно определяемыми коэффициентами. Эти коэффициен-

ты принимаются равными нулю для отрицательных значений индекса функции $u_N(x)$. Так, для $N = -1$ решение содержит лишь одну компоненту: $F_{-1} = (0, 0, 0, C_4(z)u_0)$; для $N = 0$ решение есть $F_0 = (0, C_2(z)u_0, 0, C_4(z)u_1)$, и для $N \geq 2$ все четыре компоненты вектора (1.41) будут отличны от нуля. После подстановки вектора (1.41) в уравнение Шрёдингера с гамильтонианом (1.38) и проекции на базис, состоящий из собственных функций $c_{\nu_j}(z)$ операторов (1.39), задача сводится к алгебраической проблеме собственных значений и собственных векторов. Мы ограничимся включением двух уровней размерного квантования тяжелых и одного уровня легких дырок. Такое приближение представляется оправданным для рассматриваемых гетеропереходов с типичной концентрацией дырок $n_h = 5 \times 10^{11} \text{ cm}^{-2}$ и концентрацией обедненного слоя $N_{dep} = 10^{15} \text{ cm}^{-3}$, когда заполнена лишь первая зона размерного квантования тяжелых дырок [71, 23]. Для каждого уровня размерного квантования мы учитываем несколько первых уровней Ландау, показанных на рис. 1.6. Можно видеть, что уровни Ландау легких дырок в слабых магнитных полях имеют производную другого знака, характерную для электронов, что вызвано близостью второй подзоны тяжелых дырок. Мы предполагаем, что последующее введение периодического электрического потенциала сверхрешетки с амплитудой V_0 существенно не меняет функции $c_{\nu_j}(z)$, поскольку значения $|V_0|$, рассматриваемые в настоящей работе, много меньше энергий размерного квантования. Поэтому в дальнейших расчетах мы используем значения матричных элементов гамильтониана (1.38), вычисленные на функциях $c_{\nu_j}(z)$, рассмотренных ранее.

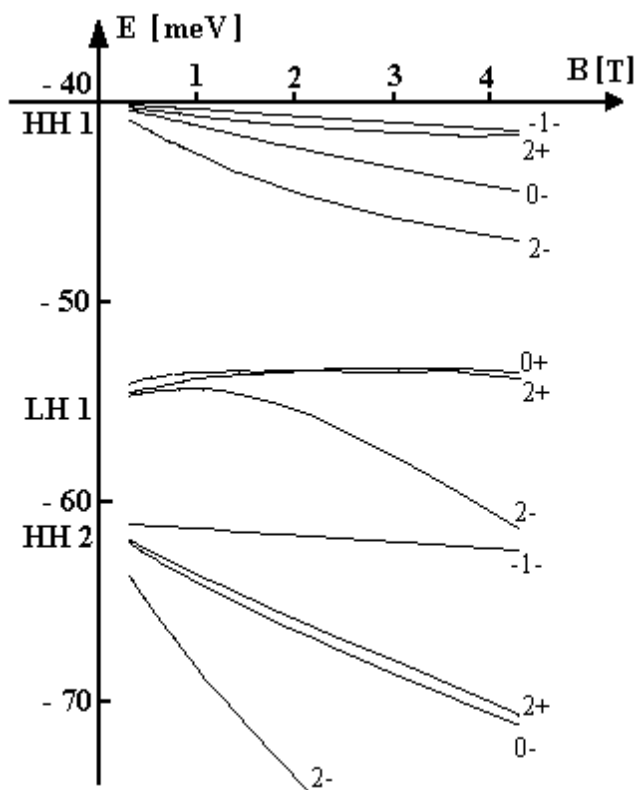


Рис. 1.6: Система дырочных уровней Ландау, отвечающих первым трем зонам размерного квантования (две зоны тяжелых дырок HH1, HH2 и одна зона легких дырок LH1). Уровни легких дырок в слабых полях имеют положительный градиент по полю, отвечающий "электроноподобному" поведению. Каждый уровень нумеруется индексом $N = -1, 0, 1, \dots$ столбца (1.41) и доминирующей z -проекцией углового момента \pm (см. текст). Здесь и далее энергия отсчитывается от потолка валентной зоны в объёмном GaAs.

1.4.2 Магнитооптика межзонных переходов

Исследование оптических переходов является одним из главных инструментов при изучении физики полупроводниковых структур [61], в том числе в присутствии магнитного поля. Теория магнитооптических явлений развивалась параллельно с исследованием самих структур, и одна из первых работ в этой области, описывающая магнитооптику с участием состояний сложной валентной зоны, была опубликована Рот, Лэксом и Цвердлингом в 1959 году [77]. В ней было установлено, в частности, что правила отбора при переходах между уровнями Ландау в валентной зоне и в зоне проводимости сильно зависят от поляризации электромагнитного излучения. Это связано со структурой атомных функций $|J; m_J\rangle$ базиса (1.37), отвечающих верхнему краю валентной зоны, и атомных функций s -типа с проекцией углового момента $\pm 1/2$, которые отвечают дну зоны проводимости и могут быть записаны в следующем виде:

$$|s \uparrow\rangle, \quad |s \downarrow\rangle, \quad (1.42)$$

где спиновые сомножители отмечены стрелкой. Поскольку в дальнейшем нам предстоит рассматривать переходы, сопровождающиеся циркулярно поляризованным излучением, мы остановимся на правилах отбора именно для такой поляризации. Здесь и далее σ^+ будет обозначать право-, а σ^- – лево-поляризованное излучение. Рассматривая структуру дырочных функций $|J; m_J\rangle$ базиса (1.37), можно заметить, что множитель перед выражением для тяжёлых дырок в $\sqrt{3}$ раз больше множителя для лёгких дырок. Это означает, что для переходов с участием тяжёлых дырок при всех прочих равных условиях интенсивность

будет в три раза больше, поскольку она пропорциональна квадрату модуля волновых функций. Поэтому на диаграммах, представленных ниже, переходы с участием тяжёлых дырок отмечены двойной стрелкой. Далее, из квантовой механики известно, что поглощению фотона с поляризацией σ^+ (σ^-) отвечает изменение орбитального квантового числа $\Delta m_J = +1$ ($\Delta m_J = -1$). Отсюда следует, что правила отбора для переходов между состояниями $|J; m_J\rangle$ базиса (1.37) и (1.42), сопровождающиеся циркулярно поляризованным излучением, выглядят следующим образом:

$$\begin{aligned} \sigma^+ : \quad \left| \frac{3}{2}; -\frac{3}{2} \right\rangle &\Longrightarrow |s \downarrow\rangle, & \left| \frac{3}{2}; -\frac{1}{2} \right\rangle &\longrightarrow |s \uparrow\rangle; \\ \sigma^- : \quad \left| \frac{3}{2}; \frac{3}{2} \right\rangle &\Longrightarrow |s \uparrow\rangle, & \left| \frac{3}{2}; \frac{1}{2} \right\rangle &\longrightarrow |s \downarrow\rangle. \end{aligned} \quad (1.43)$$

Из выражений (1.43) видно, что в переходах с различной поляризацией будут участвовать различные компоненты $|J; m_J\rangle$ базиса (1.37) и, соответственно, различные компоненты вектора огибающих функций для дырок (1.41). Поскольку различные дырочные уровни Ландау (см. рис.1.6) характеризуются различными доминирующими компонентами у вектора огибающих (1.41), это означает, что в переходах с различным направлением поляризации будут участвовать разные уровни Ландау.

Обсудим теперь, куда (или откуда) происходят переходы с участием дырочных уровней Ландау. В пионерской работе [77] при изучении объёмных полупроводников рассматривались межзонные переходы с дырочных уровней Ландау на электронные. Такие переходы изучались и в двумерных структурах; так, в работе [75] теоретически и экспериментально были рассмотрены межзонные магнитооптические пере-

ходы между уровнями Ландау в прямоугольной квантовой яме. Что касается одиночных гетеропереходов с почти треугольным профилем потенциала конфайнмента, то, как было отмечено выше, они характеризуются одним типом носителей, т.е. являются структурами n - или p -типа. Поэтому было предложено изучать переходы между уровнями Ландау и уровнями мелкой примеси, атомы которой вводятся внутрь области гетероперехода как один монослой. Соответствующая технология получила название дельта-легирования, а первые эксперименты по излучательной рекомбинации двумерных электронов и акцепторов в δ -легированном гетеропереходе GaAs/AlGaAs n -типа были представлены в 1989 году [78]. Следует отметить, что с самого начала подобные эксперименты стали проводиться в том числе и в магнитном поле [78]. В дальнейшем, в связи с успехами нанотехнологии, стало возможным проводить магнитооптические эксперименты со структурами p -типа, где в качестве примесей используется монослой акцепторных атомов [23, 24]. Кроме этого, в гетероструктурах p -типа проводились и другие магнитооптические исследования. Упомянем здесь лишь некоторые из них. Так, в работе [82] изучался циклотронный резонанс между дырочными уровнями Ландау в структуре со многими квантовыми ямами, в работе [79] были получены результаты, интерпретируемые как свидетельства вигнеровской кристаллизации в дырочном газе, в работе [80] изучалась экситонная фотолюминесценция в пространственно разделённом газе электронов и дырок. Следует отметить, что полученные в работах [75, 23, 24] и др. экспериментальные результаты уверенно подтвердили как нелинейный характер зависимости дырочных уров-

ней от магнитного поля (см. рис.1.6), так и правила отбора (1.43).

Магнитооптические исследования проводились также и для систем со спектрами типа "бабочки" Хофштадтера. Так, в 1996 году вышла работа [81], где проводились расчёты, свидетельствующие о проявлении структуры магнитных подзон в поглощении излучения дальнего ИК диапазона. В следующем году в гетеропереходе n -типа с поверхностной решёткой антиоточек были проведены измерения спектров магнитолюминесценции при межзонных переходах из электронных магнитных подзон в состояния акцепторов [22]. В 1998 году в работах [13, 14] были проведены исследования циклотронного резонанса между магнитными подзонами электронов в решётке квантовых антиоточек для различной поляризации электромагнитного излучения. Можно надеяться, что наши расчёты по магнитооптике межзонных переходов между дырочными подзонами и донорными уровнями, представленные в третьей главе, будут способствовать экспериментальному обнаружению спектров типа "бабочки" Хофштадтера в 2D дырочном газе с латеральной модуляцией.

1.5 Квантование холловской проводимости в латерально модулированных системах

В последние два десятилетия были исследованы как теоретически, так и экспериментально фундаментальные характеристики 2D электронных систем, где электронный газ, находящийся в режиме целочисленного квантового эффекта Холла (КЭХ), подвергается воздействию периодического электрического потенциала. Как уже было отмечено вы-

ше, если число квантов магнитного потока рационально и равно p/q , каждый уровень Ландау расщепляется на p подзон. Холловская проводимость σ_H одного полностью заполненного уровня Ландау равна по абсолютной величине $e^2/2\pi\hbar = e^2/h$ [83]. Поэтому можно было ожидать, что каждая магнитная подзона будет давать вклад в холловскую проводимость, равный e^2/ph , но, в соответствии с аргументами калибровочного характера [83, 84], проводимость любой полностью заполненной подзоны (в том числе и магнитной) квантуется в целых значениях e^2/h . Впервые подтверждение этого правила для периодически модулированных 2D систем было получено Таулессом, Комото, Найтингейлом и де Нижсем в их пионерской работе [9]. Ими была детально изучена простая квази-одномерная модель сильно анизотропной 2D решётки, когда внедиагональными членами в уравнении (1.28) при $V_2 \ll V_1$ можно пренебречь. Для этого случая в работе [9] было получено явное выражение для σ_H . Именно, если уровень Ферми попадает в r -ю щель N -го расщеплённого уровня Ландау, холловская проводимость при таком E_F может быть записана следующим образом:

$$\sigma_H = \frac{e^2}{h}(t_r + N - 1), \quad (1.44)$$

где целое число t_r определяется с помощью диофантова уравнения

$$t_r p + s_r q = r. \quad (1.45)$$

Уравнение (1.45) имеет целочисленные решения для некоторых целых значений s_r , причём $|s_r| \leq p/2$. Следуя работе [9], поясним метод расчёта t_r на простом примере $p/q = 3/1$. В этом случае в приближении, когда $V_1 = 0$, диагональная часть системы (1.28) определяет

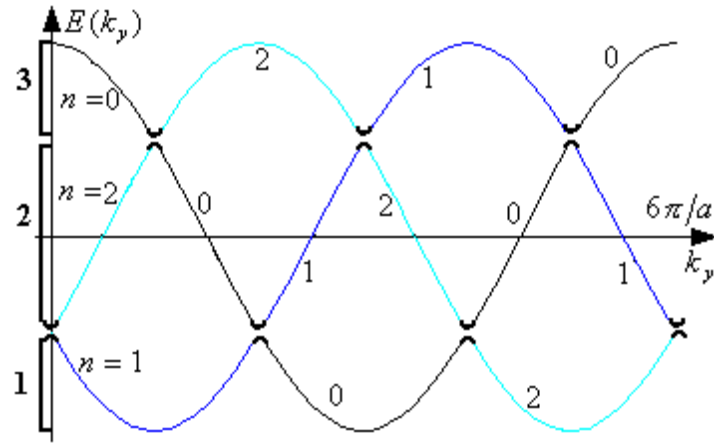


Рис. 1.7: Законы дисперсии для сильно анизотропного предела уравнения (1.28) при $V_2 \ll V_1$ и $p/q = 3/1$, показанные для одного периода изменения аргумента $0 \leq k_y \leq 6\pi/a$. Цифрами 0, 1, 2 отмечены значения n в формулах (1.46).

законы дисперсии в трёх невзаимодействующих подзонах для трёх последовательных значений n , например, для $n = 0, 1, 2$:

$$\begin{aligned}
 E_1(k_y) &= 2V_1 \cos\left(\frac{k_y a}{3}\right), \\
 E_2(k_y) &= 2V_1 \cos\left(\frac{k_y a}{3} + \frac{2\pi}{3}\right), \\
 E_3(k_y) &= 2V_1 \cos\left(\frac{k_y a}{3} + \frac{4\pi}{3}\right).
 \end{aligned} \tag{1.46}$$

Необходимо отметить, что из (1.28) следует инвариантность законов дисперсии (1.46) по отношению к замене n на $n + 3m$, где m – любое целое число. Если теперь учесть малые внедиагональные члены в системе (1.28), то законы дисперсии (1.46) в точках пересечения расщепятся, что приведёт к образованию трёх энергетических зон. Это иллюстрирует рис.1.7, где законы дисперсии показаны вместе со значением $n = 0, 1, 2$ для одного периода изменения аргумента k_y . Пусть теперь на систему наложено однородное электрическое поле вдоль оси y . Это поле вызовет линейное изменение во времени переменной k_y , че-

му соответствует движение слева направо вдоль каждой из трёх дисперсионных кривых на рис.1.7. Заметим, что из рис.1.7 видно, что после прохождения периода $0 \leq k_y \leq 6\pi/a$ переменной k_y значение n при $k_y = 0$ и $k_y = 6\pi/a$ отличаются на некоторое целое число. Это число и есть та величина s_r ($r = 1, 2, 3$), которая входит в диофантово уравнение (1.45). Между тем значение n определяет координату x центра осцилляторной функции в разложении (1.26). Это означает, что положение центра по x изменяется под действием электрического поля вдоль y , т.е. протекает холловский ток. Величина и направление переноса центров осцилляторных функций для каждой подзоны ($r = 1, 2, 3$) определяется полным изменением n за один период k_y , т.е. величиной s_r . Так, для случая, показанного на рис.1.7, где $p = 3$ и $q = 1$, мы будем иметь следующие соотношения r , s_r и t_r : для подзоны 1 имеем $r = 1$, $s_1 = 1$ и из уравнения (1.45) $t_1 = 0$, для подзоны 2 $r = 2$, $s_2 = -1$ и $t_2 = 1$, и, наконец, для подзоны 3 имеем $r = 3$, $s_3 = 0$ и $t_3 = 1$. Полученные результаты свидетельствуют о том, что вклад в холловский ток в данном примере даёт лишь средняя подзона №2 [9]. Отметим, что для более сложных дробей p/q значение холловской проводимости t_r в r -й щели может принимать в единицах e^2/h самые разнообразные целочисленные значения, в том числе и отрицательные [9, 90, 20]. Необходимо упомянуть, что позднее область применения диофантова уравнения (1.45) была расширена на значительно более широкий класс систем, не обязательно квази-одномерных [87, 63, 88, 89, 90], в том числе и на 3D случай [63, 91, 34], где обобщение диофантова уравнения (1.45) известно как формула Комото-Гальперина-Ву [91].

С диофантовым уравнением (1.45) связан подход к расчёту холловской проводимости, развитый в 1982 году Стржедой [92, 93]. Если уровень Ферми находится в запрещённой зоне, нижний край которой имеет энергию E , то холловская проводимость определяется следующим образом:

$$\sigma_H = ec \frac{\partial N(E)}{\partial B} \quad (1.47)$$

где $N(E)$ есть число состояний на единицу площади, имеющих энергию меньше, чем E . Формула (1.47) широко применяется при расчётах холловской проводимости 2D электронного газа в периодическом потенциале [85, 86, 89, 12], в том числе и в присутствии взаимодействия между уровнями Ландау, индуцированного периодическим потенциалом [12]. Однако, обобщение формулы Стржеды (1.47) на системы с многокомпонентной волновой функцией представляется недостаточно обоснованным, поэтому ниже в главе 4 мы будем использовать иной подход (топологический), который обсуждается ниже. Следует отметить, что для вычисления холловской проводимости 2D электронного газа в периодическом потенциале применяются и другие подходы. Так, в работе [94] транспортные коэффициенты в решётке антиточек конечного размера 6×6 вычислялись с помощью обобщения подхода Бюттикера, заключающегося в суммировании вкладов от отдельных рассеивающих центров.

Дальнейшие исследования показали, что квантование σ_H в периодически модулированных двумерных системах имеет топологическую природу. Именно, значение σ_H для полностью заполненной зоны определяется числом и типом особенностей волновой функции в

пространстве квантовых чисел, т.е. в нашем случае, в \mathbf{k} -пространстве. Следует отметить, что первые связи задачи о блоховском электроне в магнитном поле и топологией были установлены ещё в 1980 году Б.А. Дубровиным и С.П. Новиковым [95], а в дальнейшем эти связи лишь упрочились (см, например, [96, 97, 98]). На топологическом языке формирование p магнитных подзон из расщеплённого уровня Ландау можно рассматривать как векторное расслоение магнитных блоховских функций над тором T^2 , которым является магнитная зона Бриллюэна (1.17) [96]. Действительно, сопоставление каждой точке $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$ магнитной зоны Бриллюэна одномерного комплексного вектора $\psi_{k_x k_y}$, эквивалентного двумерному вектору $(\text{Re}\psi_{k_x k_y}, \text{Im}\psi_{k_x k_y})$, можно трактовать в силу линейности уравнения Шрёдингера как сопоставление целого 2D векторного пространства, построенного на как $C\psi_{k_x k_y}$, где $C = (\text{Re}C, \text{Im}C)$. Отображение элемента этого пространства $(\text{Re}C, \text{Im}C)$ в базу, т.е. в магнитную зону Бриллюэна, является однозначным, т.к. любому $(\text{Re}C, \text{Im}C)$ отвечает зафиксированное значение $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$. Согласно теории [99], в таком случае мы имеем дело с векторным расслоением. Топологические аспекты при квантовании σ_H обсуждались также с использованием теории гомотопий [100]. Позднее доказательство существования топологического инварианта было обобщено Ниу, Таулессом и Ву на случай существования в системе взаимодействия между частицами и наличия примесей [101]. Необходимо отметить, что квантование проводимости изучалось и в случае медленных изменений во времени для потенциала в уравнении Шрёдингера [102]. Подобные ситуации с адиабатическим изменением параметров

системы привели Саймона к идее использования так называемой фазы Берри при описании квантования [103]. Эта фаза связывает холловскую проводимость со значением 2D интеграла по магнитной зоне Бриллюэна, взятом от так называемой кривизны Берри, которая фактически представляет собой результат применения формулы Кубо для проводимости [104, 105, 106]. Для нашей работы наиболее существенным будет являться результат Комото [25], который показал, что особенности волновой функции определяют топологический инвариант, являющийся первым классом Черна данной магнитной подзоны. Этот инвариант есть не что иное как холловская проводимость, выраженная в единицах e^2/h . Конкретный способ вычисления холловской проводимости 2D электронного газа в слабом периодическом потенциале был предложен в 1988 году Усовым [26]. Он показал, что значение σ_H можно связать с так называемыми циркуляциями S_m , $m = 1, 2, \dots$, вычисленными как набег фаз волновой функции при обходе особых точек \mathbf{k}_m в так называемой расширенной магнитной зоне Бриллюэна:

$$-\pi/qa \leq k_x \leq \pi/qa, \quad -\pi p/qa \leq k_y \leq \pi p/qa. \quad (1.48)$$

Существование особых точек является следствием нетривиальной топологией как обычной (1.17), так и расширенной МЗБ (1.48), являющихся тором. Усов показал [26], что при значении магнитного потока p/q холловская проводимости полностью заполненной магнитной подзоны α в единицах $-e^2/h$ имеет следующий вид:

$$\sigma_H^\alpha = \frac{e^2}{h} \left[\frac{1}{p} + \frac{q}{p} \sum_m S_m \right], \quad (1.49)$$

где сумма берётся по всем особым точкам, находящимся в расширенной МЗБ (1.48). Мы вернёмся к выводу формулы (1.49) ниже в главе 4 при

расчёте холловской проводимости 2D дырочного газа в периодическом потенциале.

1.6 Экспериментальные результаты наблюдения ”бабочки” Хофштадтера

Вопрос об экспериментальном наблюдении спектров типа ”бабочки” Хофштадтера стал актуальным с момента появления первой ”бабочки” в работе [8]. В этой статье сам Хофштадтер проводил оценки температурного уширения магнитных подзон, что привело его к выводу о неизбежном размытии ”канторовской пыли” в спектре при иррациональных значениях магнитного потока. Отсюда можно сделать вывод, что экспериментально значимыми прежде всего являются области простых рациональных значений магнитного потока p/q . Действительно, чем меньше число подзон, тем они шире и тем легче могут быть обнаружены. Кроме этого, выше в п.1.2.1 мы упомянули, что Азбелем [5] было показано, как при малой расстройке магнитного поля ”новые” подзоны, отвечающие возросшим значениям p и q , группируются вблизи ”старых”, широких подзон (см. рис.1.1). Описываемые ниже результаты экспериментов подтверждают вывод о значимости рациональных точек на ”бабочке” Хофштадтера, которые и будут рассматриваться в последующих главах диссертации.

Следует отметить, что наблюдение ”бабочки” ведётся на различных экспериментальных образцах, где рассматриваются различные эффекты, иногда не связанные напрямую с блоховскими электронами в кристаллических решётках. Так, первые экспериментальные свидетельства

о влиянии рационального магнитного потока на физику в латерально модулированных системах были получены в 1984 году в работе [107]. Авторами этой работы экспериментально наблюдались скачки критической температуры в периодической сетке сверхпроводящего алюминия, отвечающие целым и дробным значениям магнитного потока через ячейку сетки. В дальнейшем исследование сверхпроводящих сетей в магнитном поле было продолжено в ряде работ [108, 109], в том числе и для 3D случая [108]. Кроме этого, важные для экспериментаторов эффекты случайно распределённых примесей на столкновительное уширение и проводимость для 2D блоховских электронов в магнитном поле рассматривались теоретически в 1992 году в работе [11]. Позднее начались экспериментальные исследования транспортных свойств 2D электронов в периодически модулированных гетеропереходах [18, 19]. Такие системы оказались удобными для изучения как классических эффектов, так и систем со спектрами, состоящими из магнитных подзон. Так, в работах [17, 110, 111] наблюдались осцилляции продольного магнитосопротивления в ситуации, когда классический циклотронный радиус $2R_c$ огибает целое число антиточек, либо возникают многократные отражения от одной антиточки. Если динамика электронов становится сложной, может наблюдаться переход к хаосу [112, 113]. Наконец, в 2001 году группой К. фон Клитцинга были представлены результаты измерения холловской проводимости в 2D электронном газе, модулированном периодическим потенциалом [20]. На рис.1.8 мы воспроизводим один из рисунков работы [20], на котором представлены экспериментальные результаты (рис.1.8а) измерения продольного сопротивления

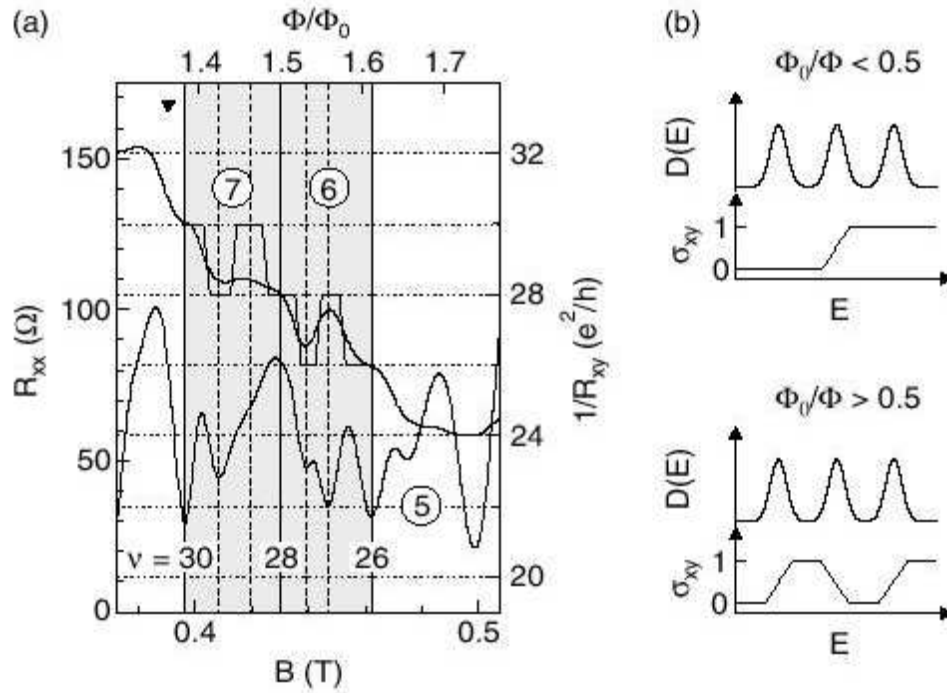


Рис. 1.8: (а) Экспериментальные результаты [20] измерения продольного сопротивления (левая шкала) и холловской проводимости (правая шкала) для 2D электронного газа в периодическом потенциале. В затемнённой области, отвечающей значениям магнитного потока, близкого к $\Phi/\Phi_0 = 3/2$ квантам, наблюдается согласие с теоретической зависимостью, показанной внизу справа на (b).

(левая шкала) и холловской проводимости (правая шкала) для 2D электронного газа в периодическом потенциале сверхрешётки квантовых антиточек с периодом $a = 120$ нм, выполненные при $T = 50$ мК. В затемнённой области, отвечающей значениям магнитного потока, близкого к $\Phi/\Phi_0 = 3/2$ кванта, наблюдается согласие с теоретической зависимостью холловской проводимости от положения E_F , показанной внизу справа на рис.1.8b.

Эксперименты по измерению холловской проводимости в 2D дырочном газе также проводились [114], вначале без дополнительного периодического потенциала. Теория целочисленного КЭХ на дырочных уровнях Ландау существенно не отличается от электронной [114], а

дробный КЭХ в дырочном газе исследовался отдельно [115]. Наконец, на 15-й Международной конференции по сильным магнитным полям в физике полупроводников (Оксфорд, Великобритания, август 2002г) Д. Вейсс представил доклад, в котором было рассказано о первых экспериментах по магнетотранспорту в 2D дырочном газе, модулированном периодическим потенциалом [21]. Теоретический расчёт холловской проводимости, также впервые представленный нами на вышеупомянутой конференции [43], составляет четвертую главу диссертации.

Ещё один эксперимент, доказавший возможность наблюдения ”бабочки” Хофштадтера, был осуществлён Кюлем и Штокманом в 1997 году на установке, представляющей собой металлический волновод с периодической последовательностью металлических рассеивателей [116]. В эксперименте изучалась зависимость пропускания электромагнитной волны с данным волновым числом k от пространственной длины периода, на котором последовательно меняется высота рассеивателей. Эта длина выражается через число рассеивателей $q = 1, 2, \dots, 100$ в одном периоде. Авторами работы [116] было показано, что запись элементов трансфер-матрицы для рассеивания на соседних штырьках в волноводе имеет ту же форму, что и для матричной формулировки уравнения Харпера (1.23) [8]. Результат эксперимента показан на рис.1.9, где тёмные участки отвечают пропусканию волны, а по оси ординат отложена величина $\alpha = 1/q$. Структура ”бабочки” Хофштадтера хорошо различима, причём вторая ”бабочка” справа отвечает второй моде для данного волновода. Подводя итог описанным в данном пункте экспериментам, можно выразить уверенность, что в будущем число успешных экспериментальных наблюдений ”бабочки” Хофштадтера будет только возрастать.

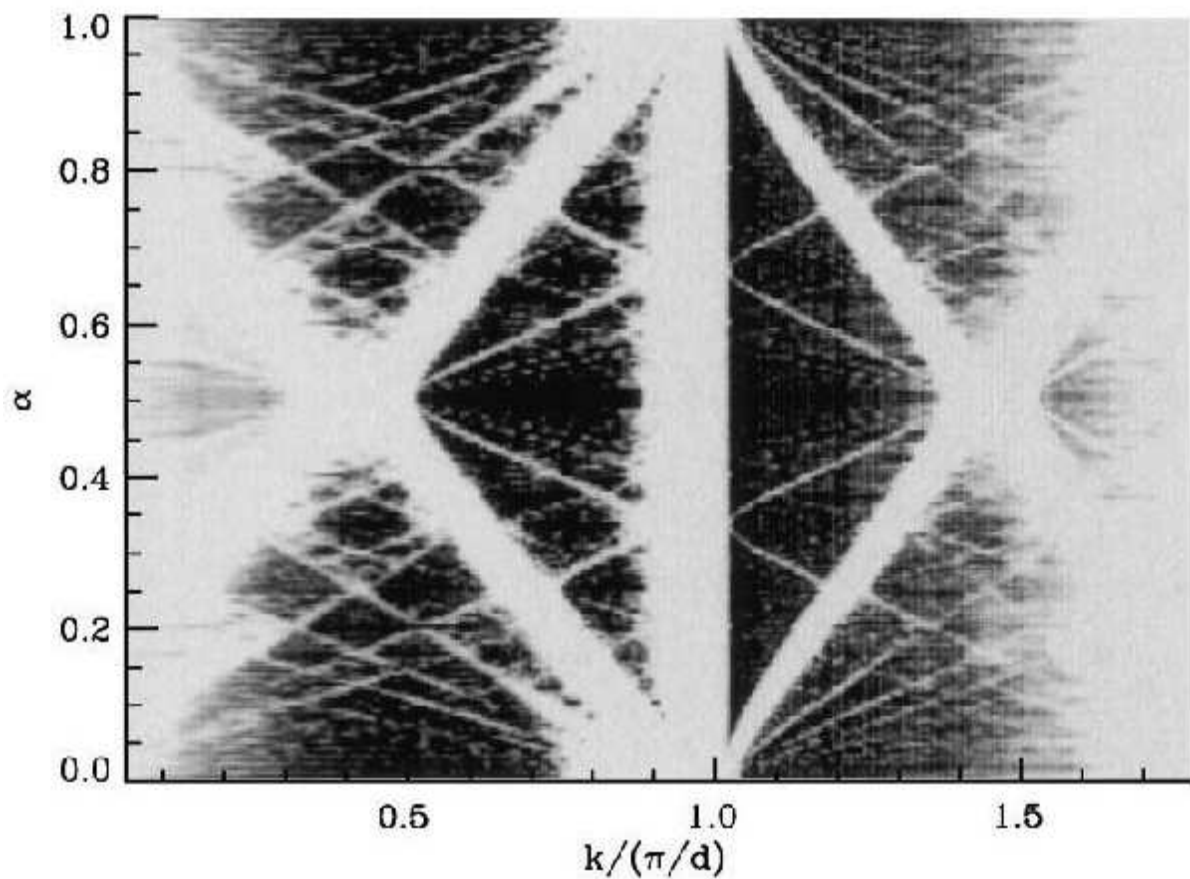


Рис. 1.9: Спектр пропускания электромагнитных волн (тёмные участки) в волноводе с периодической последовательностью рассеивателей [116]. По оси абсцисс отложен волновой вектор в единицах π/d , где $d = 20.5$ mm есть расстояние между рассеивателями (металлическими штырьками). По оси ординат отложена обратная величина $\alpha = 1/q$ к числу q рассеивателей в одном периоде ($q \leq 100$). Вторая "бабочка" справа отвечает второй моде для волновода.

Глава 2

Трёхмерные кристаллы в сверхсильном магнитном поле

2.1 Формирование новых поверхностей Ферми в простой кубической решётке

В простой кубической решётке, построенной на векторах \mathbf{a}_1 , \mathbf{a}_2 , \mathbf{a}_3 , квантовые состояния электрона классифицируются в соответствии с неприводимыми представлениями группы магнитных трансляций, которые имеют следующий вид в калибровке Ландау 1.14:

$$\mathbf{a}_{mag} = nq\mathbf{a}_1 + m\mathbf{a}_2 + l\mathbf{a}_3, \quad (2.1)$$

где n, m, l есть наборы целых чисел. Квазиимпульс \mathbf{k} принимает значения, расположенные в магнитной зоне Бриллюэна

$$-\frac{\pi}{qa} \leq k_x \leq \frac{\pi}{qa}, \quad -\frac{\pi}{a} \leq k_y \leq \frac{\pi}{a}, \quad -\frac{\pi}{a} \leq k_z \leq \frac{\pi}{a}. \quad (2.2)$$

В приближении сильной связи волновая функция электрона, удовлетворяющая условиям Пайерлса (1.18), может быть записана в следую-

щей форме: [35]

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{n,m,l} g_n(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{a}_n) \exp\left(-2\pi i \frac{p}{q} \frac{(y-ma)}{a} n\right) \times \\ \times \psi_0(x-na, y-ma, z-la) \quad (2.3)$$

где $\psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{a}_n)$ обозначает атомную функцию s -типа. Далее мы увидим, что зависящая от направления перекрытия атомных функций фаза $2\pi \frac{p}{q} \frac{(y-ma)}{a} n$ будет играть важную роль в нашей задаче.

После подстановки функции (2.3) в уравнение Шрёдингера и вычисления интегралов перекрытия между соседними узлами мы приходим к системе разностных уравнений на коэффициенты g_n . Отметим, что магнитное поле оказывает нетривиальное влияние на интеграл перекрытия между функциями соседних узлов в x направлении:

$$A = \int \exp\left(\pm 2\pi i \frac{p}{q} \frac{y-ma}{a}\right) \psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{a}'_n) (V(\mathbf{r}) - U(\mathbf{r} - \mathbf{a}_n)) \psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{a}_n) d\tau, \quad (2.4)$$

где $\mathbf{a}'_n = ((n \pm 1)a, ma, la)$, $V(\mathbf{r})$ обозначает потенциал кристаллической решётки с периодом a во всех трёх направлениях. Вычисляя интегралы перекрытия в приближении среднего значения, мы выполняем в (2.4) подстановку $y = ma$, что даёт $A = E_0$, где E_0 представляет собой интеграл перекрытия в отсутствие магнитного поля. Для направления y интеграл перекрытия есть

$$B = \exp\left(\pm 2\pi i \frac{p}{q} n\right) \int \psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{a}'_n) (V(\mathbf{r}) - U(\mathbf{r} - \mathbf{a}_n)) \psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{a}_n) d\tau, \quad (2.5)$$

где $\mathbf{a}'_n = (na, (m \pm 1)a, la)$, а в направлении z , параллельном магнитному полю, интеграл перекрытия не изменяется и остаётся равным E_0 . В результате мы получаем хорошо известное уравнение Харпера

на коэффициенты g_n [1]:

$$\exp(ik_x a)g_{n+1} + \exp(-ik_x a)g_{n-1} + 2g_n \cos\left(2\pi n \frac{p}{q} + k_y a\right) = \varepsilon(k_x, k_y, k_z)g_n, \quad (2.6)$$

где

$$\varepsilon(k_x, k_y, k_z) = \varepsilon_{\perp}(k_x, k_y) - 2 \cos k_z a \quad (2.7)$$

обозначает безразмерную энергию, измеряемую в единицах E_0 . Спектр $\varepsilon_{\perp}(k_x, k_y)$ системы (2.6) состоит из q подзон и зависит от параметра p/q , представляющего собой число квантов магнитного потока через ячейку (рис.1.1)). Если число квантов потока иррационально, спектр является канторовским множеством.

Для некоторых простых рациональных значений $p/q = 1/2, 1/3, 1/4$ является возможным решить систему (2.6) аналитически. В результате можно получить следующие законы дисперсии в q магнитных подзонах: для $p/q = 1/2$ (две подзоны) имеем

$$\varepsilon_{\perp}^{(1,2)}(k_x, k_y) = \pm 2\sqrt{\cos^2 k_x a + \cos^2 k_y a}, \quad (2.8)$$

для $p/q = 1/3$ (три подзоны)

$$\varepsilon_{\perp}^{(1)}(k_x, k_y) = -2\sqrt{2} \cos\left(\frac{2\pi}{3} + (\arctan \beta)/3\right), \quad (2.9)$$

$$\varepsilon_{\perp}^{(2)}(k_x, k_y) = 2\sqrt{2} \cos\left(\frac{\pi}{3} + (\arctan \beta)/3\right), \quad (2.10)$$

$$\varepsilon_{\perp}^{(3)}(k_x, k_y) = -2\sqrt{2} \cos\left((\arctan \beta)/3\right), \quad (2.11)$$

где введено обозначение $\beta = \sqrt{8 - \alpha^2}/\alpha$, $\alpha = \cos 3k_x a + \cos 3k_y a$; и для $p/q = 1/4$ (четыре подзоны) получим

$$\varepsilon_{\perp}^{(1,2,3,4)}(k_x, k_y) = \pm \sqrt{4 \pm 2\sqrt{4 - \sin^2 2k_x a - \sin^2 2k_y a}}. \quad (2.12)$$

На рисунках 2.1 и 2.2 показаны поверхности Ферми в нижней подзоне для $p/q = 1/2$, полученные с помощью (2.7) и (2.8), в первой зоне Бриллюэна $-\pi/qa \leq k_x \leq \pi/qa$, $-\pi/qa \leq k_y \leq \pi/qa$, $-\pi/a \leq k_z \leq \pi/a$. Показаны три поверхности, отвечающие трём характерным значениям энергии. Для поверхности эллиптического типа (1) ($|\mathbf{k}| \rightarrow 0$) с помощью (2.7) и (2.8) может быть получено простое аналитическое выражение для спектра $\varepsilon(\mathbf{k})$. Соответствующие эффективные массы определяются как

$$m_{x,y}^* = \frac{\hbar^2}{\sqrt{2}E_0a^2}, \quad m_z^* = \frac{\hbar^2}{2E_0a^2}. \quad (2.13)$$

Асимптотическое поведение спектра вблизи точки $k_{x,y} \rightarrow \pi/2a$ (поверхность типа (2)) описывается законом $\varepsilon(k_x, k_y, k_z) \sim \sqrt{k_x^2 + k_y^2} - 2 \cos k_z$.

Далее мы обсудим правила квантования при значениях потока, близких к значению $p/q = 1/2$:

$$\frac{p}{q} = \frac{1}{2} + \frac{1}{q'}, \quad q' \gg 1, \quad (2.14)$$

что соответствует магнитному полю $H = H(1/2) + \Delta H(1/q')$. Как можно видеть из рис.1.1, в области значений рядом с $p/q = 1/2$ спектр представляет из себя систему узких подзон (практически дискретных уровней). Можно различить области эквидистантного спектра, точки сгущения и участки, где подзоны расположены по закону $\varepsilon_{\perp} \sim \sqrt{N}$, (через N обозначен номер подзоны). Спектр $\varepsilon_{\perp}(k_x, k_y)$ уравнения Харпера вблизи половины кванта потока может быть исследован аналитически в силу рекурсивного характера своей структуры. Для $p/q = 1/2$ имеются две подзоны, отвечающие двум подсистемам во множестве собственных векторов. Можно вывести из уравнения Харпера, что каждый собственный вектор из подсистемы соответствует изменению индекса n не на единицу, а на двойку.

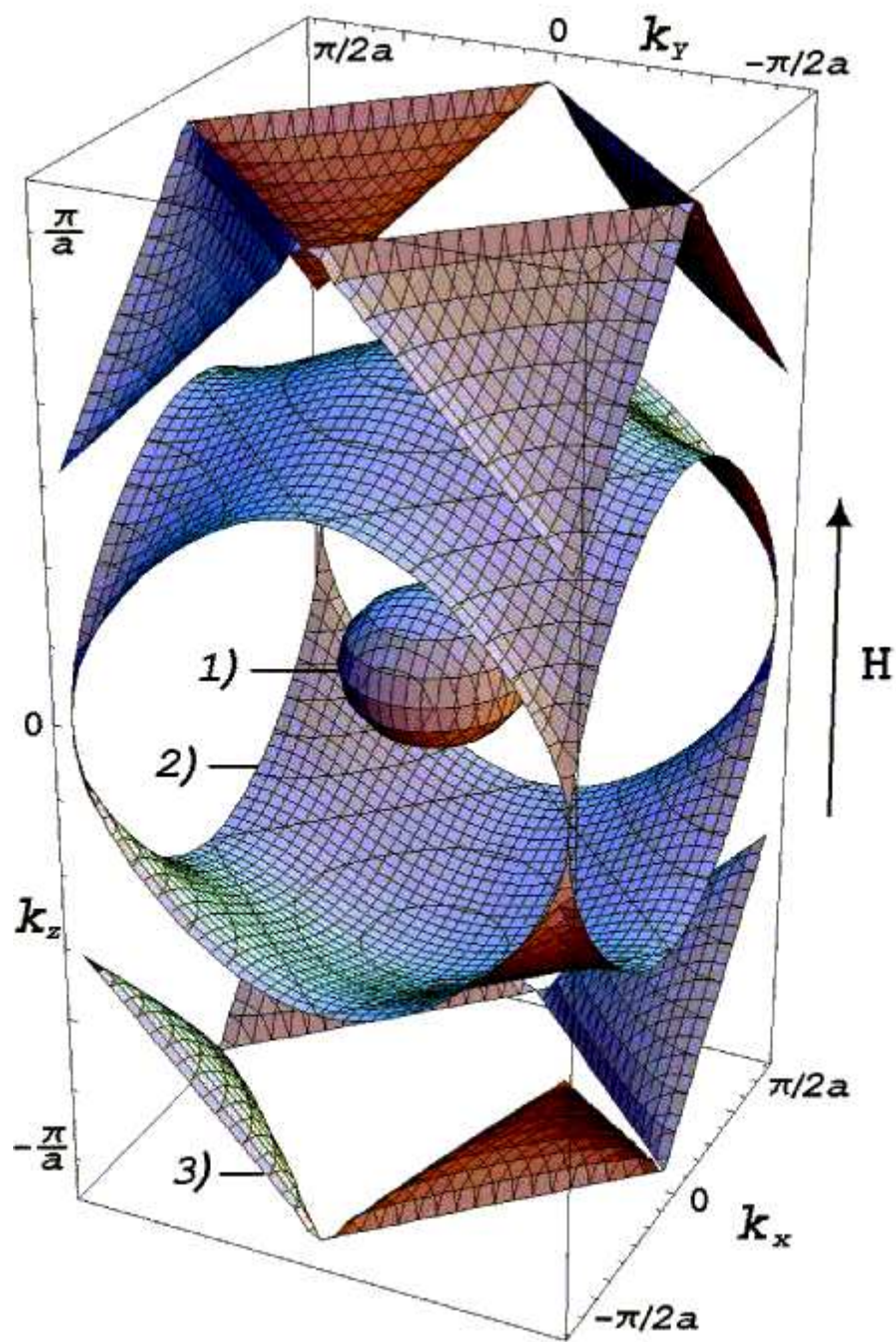


Рис. 2.1: Поверхности Ферми в нижней магнитной подзоне 3D кристалла с простой кубической решёткой при $p/q = 1/2$, $\mathbf{H} \parallel \mathbf{a}_3$. 1) $\varepsilon = -4.3$; 2) $\varepsilon = -2.0$; 3) $\varepsilon = 0.0$;

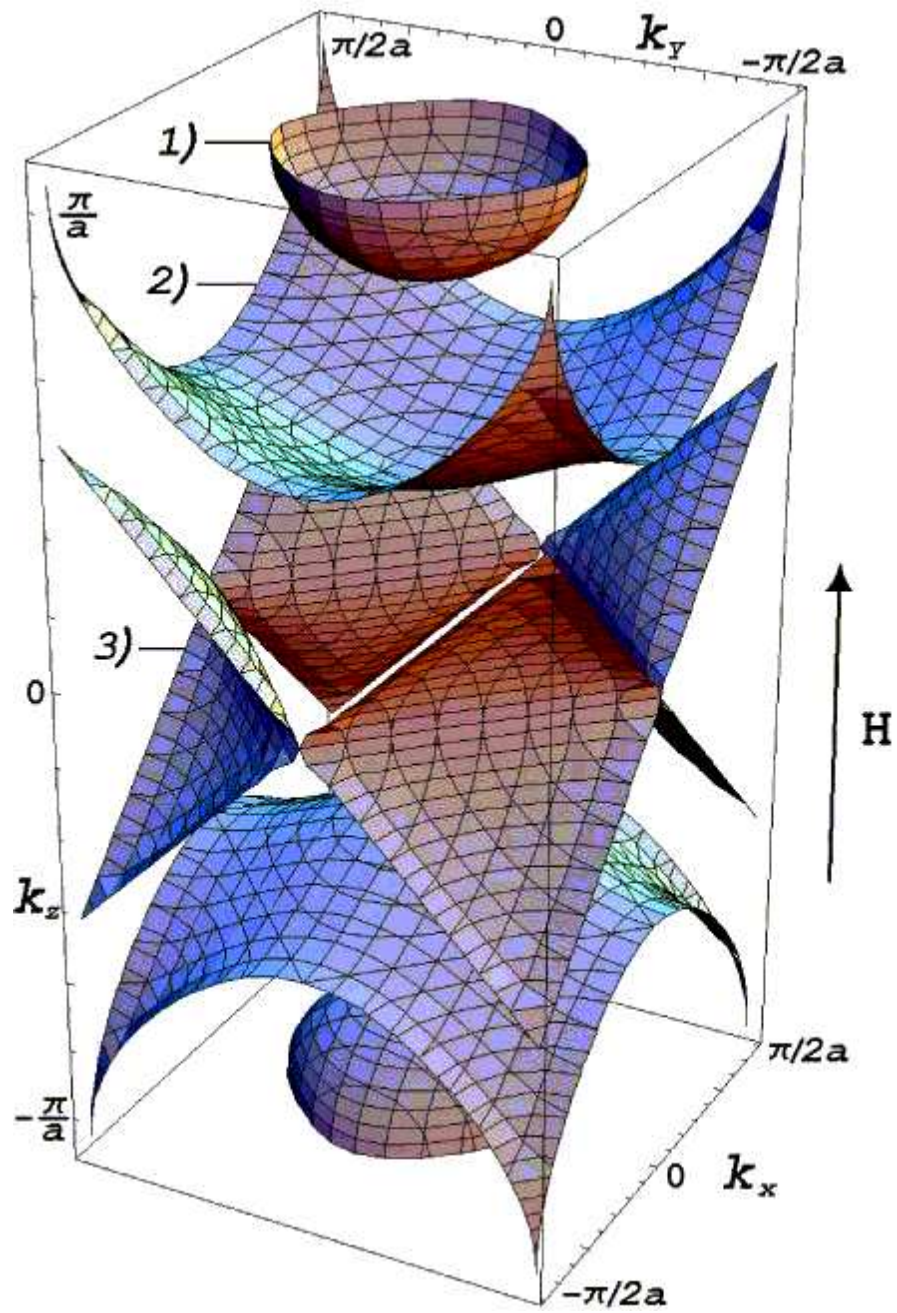


Рис. 2.2: Поверхности Ферми в верхней магнитной подзоне 3D кристалла с простой кубической решёткой при $p/q = 1/2$, $\mathbf{H} \parallel \mathbf{a}_3$. 1) $\varepsilon = 4.3$; 2) $\varepsilon = 2.0$; 3) $\varepsilon = 0.0$.

Для диагонального члена уравнение Харпера при значении потока (2.14) получается выражение $2 \cos(\pi n + 2\pi n/q') g_n = 2 \cos \pi n \cos(2\pi n/q') g_n$. Видно, что теперь новым периодом системы является число q' . Поскольку $\cos \pi n = (-1)^n$, система уравнений (2.6) будет состоять из двух подсистем, отличающихся лишь знаком. Уравнение для подсистемы при $(k_x = k_y = 0)$ имеет вид:

$$g_{n+2} + g_{n-2} + 2 \cos \frac{4\pi}{q'} n g_n = (\varepsilon_{\perp}^2 - 4) g_n. \quad (2.15)$$

Теперь $\varepsilon_{\perp}^2 - 4 = \varepsilon'_{\perp}$ есть энергия в уравнении Харпера (2.6), а $\varepsilon_{\perp} = \pm \sqrt{\varepsilon'_{\perp} + 4}$ описывает структуру спектра вблизи $p/q = 1/2$ и $\cos k_z a = 0$. Два знака перед квадратным корнем отвечают двум группам магнитных подзон. Закон дисперсии ε_{\perp} описывает все участки спектра вблизи $p/q = 1/2$ (рис.1.1). Из выражений (2.15) можно получить корневой закон вблизи $\varepsilon_{\perp} = 0$, точки сгущения $\varepsilon_{\perp} = \pm 2$, а также уровни Ландау вблизи $\varepsilon_{\perp} = \pm 2\sqrt{2}$. Данные особенности спектра можно также получить с помощью правил квантования Лифшица-Онзагера, применённого на новых поверхностях Ферми, показанных на рис.2.1 и 2.2. Легко увидеть, что магнитное квазиклассическое квантование на поверхностях типа (1) приводит к эквидистантному спектру возле дна нижней магнитной подзоны. Соответственно, квантование на поверхностях типа (2) вблизи $k_z \rightarrow 0$ приводит к корневому характеру закона дисперсии. Наконец, можно видеть, что на рис.2.1 и 2.2) поверхностям типа (3) отвечают орбиты с самопересечением, которым сопоставляются точки сгущения в спектре ε_{\perp} вблизи $p/q = 1/2$ (см. рис.1.1). Необходимо отметить, что расстояние между уровнями, полученное из (2.15), имеет то же значение, что и после вывода из правил квазиклассического

квантования.

В соответствии с уравнением Харпера (2.6), а также выражением (2.7), должно наблюдаться частичное перекрытие между q магнитными подзонами. При значении $p/q = 1/2$ перекрытие имеет место в интервале энергий $(-2, 2)$. Ясно, что при значениях электронной концентрации, отвечающей положению уровня Ферми $\varepsilon_F \in (-2, 2)$ и величине магнитного поля, $H = H(1/2) + \Delta H(1/q')$, должны наблюдаться осцилляции Де Гааза - Ван Альфена с различными периодами, соответствующими разным сериям уровней (см. рис.1.1).

При описании квантовых состояний блоховского электрона в магнитном поле с помощью функции вида (2.3) необходимо сделать следующее замечание. Такая функция описывает, вообще говоря, неоднородное распределение электронной плотности на узлах решётки, что является следствием различной величины коэффициентов $g_n(\mathbf{k})$ для различных узлов n . Однако, в реальных кристаллах вследствие кулоновского взаимодействия статическая электронная плотность должна сохранять симметрию решётки даже при наличии магнитного поля. Указанная проблема разрешается благодаря вырожденности спектра уравнения Харпера. Именно, этот спектр является q -кратно вырожденным, поскольку $\varepsilon(k_x, k_y + 2\pi j/qa, k_z) = \varepsilon(k_x, k_y, k_z)$, $j = 0, 1, 2, \dots, q - 1$, что позволяет записать волновую функцию с однородной электронной плотностью в виде линейной комбинации функций (2.3). Введём обозначение

$$\psi'_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{j=0}^{q-1} C_j(\mathbf{k}) \hat{K}_j \hat{T}_{ja} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (2.16)$$

где $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ is from (2.3), $C_j(\mathbf{k}) = \exp(-ik_x ja)$, $\hat{T}_{ja} \psi = \psi(x + ja, y, z) \exp(ief/\hbar c)$ ($f = -Hyja$), а оператор \hat{K}_j переводит $\psi_{\mathbf{k}}$ со зна-

чением $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ в функцию $\psi_{\mathbf{k}'}$, которой отвечает $\mathbf{k}' = (k_x, k_y - 2\pi rj/qa, k_z)$. После этих преобразований мы можем записать функцию (2.16) в форме

$$\psi'_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = D(\mathbf{k}) \sum_{\mathbf{n}} \exp\left(-2\pi i \frac{p}{q} \frac{(y - ma)}{a} n\right) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{a}_{\mathbf{n}}) \psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{a}_{\mathbf{n}}), \quad (2.17)$$

где $D(\mathbf{k}) = \sum_{j=0}^{q-1} g_{n+j}(\mathbf{k})$ не зависит от n в силу периодичности системы. Таким образом, волновая функция (2.17) описывает однородное распределение электронной плотности на узлах решётки и при этом отвечает той же энергии, что и $\psi_{\mathbf{k}}$.

Рассмотрим далее постановку задачи, при которой простая кубическая решётка помещена в магнитное поле, ориентированное вдоль диагонали квадрата в плоскости (x, y) . Магнитное поле величины H имеет в таком случае следующие декартовы координаты в системе, связанной с рёбрами куба:

$$\mathbf{H} = \frac{H}{\sqrt{2}}(1, 1, 0). \quad (2.18)$$

Удобно выбрать новую систему координат (x_1, x_2, x_3) , совершив преобразование поворота вокруг оси z на угол $\pi/4$:

$$\begin{aligned} x &= \frac{x_3 - x_1}{\sqrt{2}}, \\ y &= \frac{x_3 + x_1}{\sqrt{2}}, \\ z &= x_2. \end{aligned} \quad (2.19)$$

В новой системе координат выберем элементарную ячейку, которая представляет собой собой прямоугольный параллелепипед, в основании которого в плоскости (x_1, x_3) находится квадрат со стороной $\sqrt{2}a$, а высота по-прежнему равна a . Такая ячейка является не примитивной, т.к. состоит из двух атомов. По сравнению с простой кубической ячейкой

дополнительные узлы находятся в центрах верхней и нижней граней. В такой системе координат магнитное поле направлено по-прежнему вдоль одного из базисных векторов решётки, а именно, вдоль \mathbf{a}_3 . В соответствии с общими принципами, в данной ситуации классификация электронных состояний является возможной [6]. Первая зона Бриллюэна для новой решётки имеет объём, в два раза меньший по сравнению с исходным. Магнитное поле, как это следует из (2.19), имеет координаты $\mathbf{H} = H(0, 0, 1)$, поэтому удобно выбрать калибровку векторного потенциала в форме $\mathbf{A} = (-H x_2, 0, 0)$. При этом волновая функция в приближении сильной связи может быть записана в следующем виде:

$$\begin{aligned} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{n}} g_n(\mathbf{k}) \left\{ \exp\left(2\pi i \frac{p x_1 - m\sqrt{2}a}{q a/\sqrt{2}} n\right) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{a}_n) \psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{a}_n) + \right. \\ \left. + \exp\left[2\pi i \frac{p x_1 - (m + 1/2)\sqrt{2}a}{q a/\sqrt{2}} n\right] \exp(i\mathbf{k}(\mathbf{a}_n + \mathbf{d})) \psi_0(\mathbf{r} - (\mathbf{a}_n + \mathbf{d})) \right\}. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Здесь $\mathbf{k}\mathbf{a}_n = k_1\sqrt{2}am + k_2an + k_3\sqrt{2}al$, через ψ_0 обозначена изолированная атомная функция в присутствии магнитного поля, дающая вклад с амплитудой $g_n(\mathbf{k})$, который является периодической функцией n : $g_{n+q} = g_n$. Индексы (m, n, l) независимо пробегают ряд целых значений, причём n нумерует узлы в направлении оси x_2 перпендикулярно магнитному полю. Сумма берётся по всем узлам решётки, причём два слагаемых в (2.20) соответствуют двум кристаллическим подрешёткам, существующим в такой геометрии. Именно, каждая из полрешёток имеет структуру с простой тетрагональной симметрией, для которой элементарная ячейка есть прямоугольный параллелепипед с квадратом стороны $\sqrt{2}a$ в основании и высотой a . Две подрешётки смещены друг относительно друга на вектор, имеющий в системе (x_1, x_2, x_3) координаты $(a/\sqrt{2}, 0, a/\sqrt{2})$. Группа магнитных трансляций строится путём q -кратного удлинения периода вдоль направления оси x_2 : $x_2 \rightarrow x_2 + qa$.

В направлениях x_1 и x_3 трансляции не меняются, их период в новой координатной системе имеет величину $\sqrt{2}a$, равную диагонали квадрата со стороной a . Классификация электронных состояний становится возможной, если число квантов магнитного потока Φ/Φ_0 через площадь $a^2/\sqrt{2}$, представляющую собой минимальную площадь области между узлами в проекции на плоскость, перпендикулярную магнитному полю, есть рациональное число: $\Phi/\Phi_0 = p/q$ где p и q – целые взаимно простые числа.

Далее, как и в предыдущей задаче, выполняется подстановка волновой функции, теперь определяемой (2.20), в уравнение Шрёдингера и следует расчёт интегралов перекрытия. В результате получается система уравнений, определяющих энергию ε и амплитуды $g_n(\mathbf{k})$:

$$e^{ik_2a} g_{n+1} + e^{-ik_2a} g_{n-1} + 4 \cos\left(\frac{k_3a}{\sqrt{2}}\right) \cos\left(2\pi\frac{p}{q}n + \frac{k_1a}{\sqrt{2}}\right) g_n = \varepsilon g_n. \quad (2.21)$$

Нужно отметить, что эта система может быть получена с помощью подстановки Пайерлса $\mathbf{k} \rightarrow \hat{k} - \frac{e\mathbf{A}}{\hbar c}$ в исходном спектре для нулевого магнитного поля. В старых координатах спектр записывается как $\varepsilon = 2(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$, а в новой системе (x_1, x_2, x_3) он имеет вид

$$\varepsilon = 2 \cos k_2 a + 4 \cos \frac{k_3 a}{\sqrt{2}} \cos \frac{k_1 a}{\sqrt{2}}, \quad (2.22)$$

и можно видеть взаимосвязь с этим спектром системы (2.21), представляющей собой обобщение уравнения Харпера для ориентации магнитного поля вдоль $(1, 1, 0)$. Сохраняя трёхдиагональную структуру, система (2.21) имеет несколько отличий от стандартного уравнения Харпера. Во-первых, она описывает полную, а не только ”поперечную” энергию $\varepsilon_{\perp}(k_1, k_3)$ как функцию \mathbf{k} : в системе (2.21) $\varepsilon = \varepsilon(k_1, k_2, k_3)$. Теперь сечения $k_3 = const$ отвечают плоскостям, перпендикулярным магнитному

полю, а сечения $k_1 = const$ выделяют плоскости, параллельные полю. Во-вторых, система (2.21) соответствует уравнению Харпера с анизотропией, выражающейся отношением

$$4 \cos\left(\frac{k_3 a}{\sqrt{2}}\right) = \lambda, \quad (2.23)$$

зависящим от сечения $k_3 = const$, что выделяет плоскость, перпендикулярную магнитному полю. Известно, что уравнения Харпера для значений $\lambda \neq 2$ описывает двумерную квадратную решётку с анизотропными интегралами перекрытия [57, 62]. В соответствии с выражением (2.23), интервал значений λ есть $-4 \leq \lambda \leq 4$. В квазиклассическом пределе такой интервал описывает ситуацию, где возможны открытые траектории. Доля открытых траекторий в общей топологической структуре меняется в зависимости от сечения $k_3 = const$. Например, в сечении $k_3 = \pi\sqrt{2}/3a$ значение $\lambda = 2$, что отвечает изотропному варианту уравнения Харпера, для которого существуют лишь замкнутые орбиты. Это иллюстрирует рис.2.3, где показаны поверхности Ферми (рис.2.3а,б) и спектр (рис.2.5а) для магнитного потока $p/q = 31/60$. Далее, сечение $k_3 = \pi/\sqrt{2}a$ отвечает значению $\lambda = 0$, что соответствует "полностью анизотропному" пределу для уравнения Харпера. На рис.2.4а,б можно видеть, что в этом случае имеются только открытые траектории. Этому соответствует непрерывный энергетический спектр (см. рис.2.5б). Для промежуточных значений параметра λ имеются как открытые, так и замкнутые траектории. Спектр в этом случае содержит как непрерывную, так и дискретную составляющие.

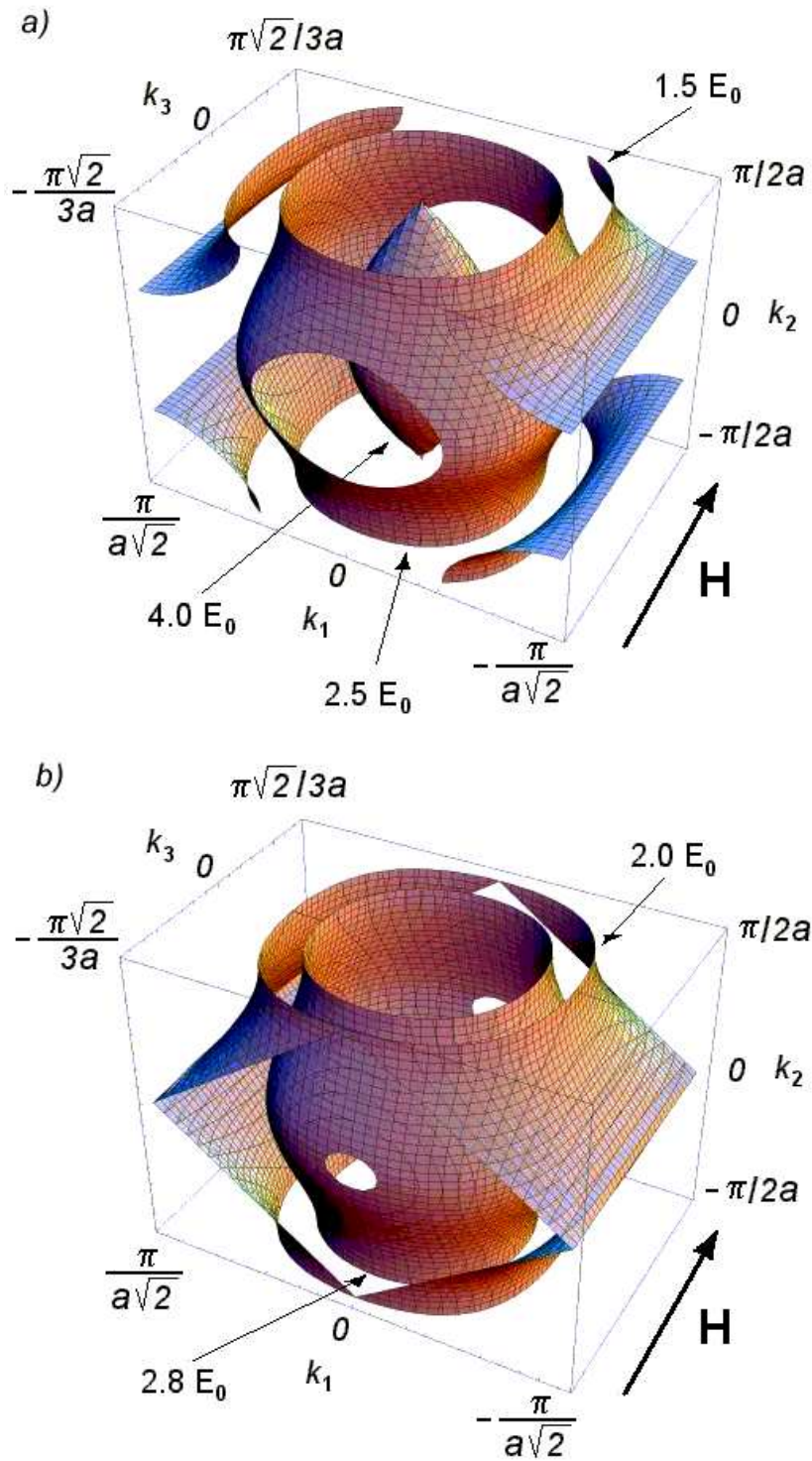


Рис. 2.3: а), б) Части поверхностей Ферми, ограниченные плоскостями $k_3 = \pm\pi\sqrt{2}/3a$ ($\lambda = 2$) при $p/q = 1/2$, $\mathbf{H} \parallel \mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2$ в верхней подзоне.

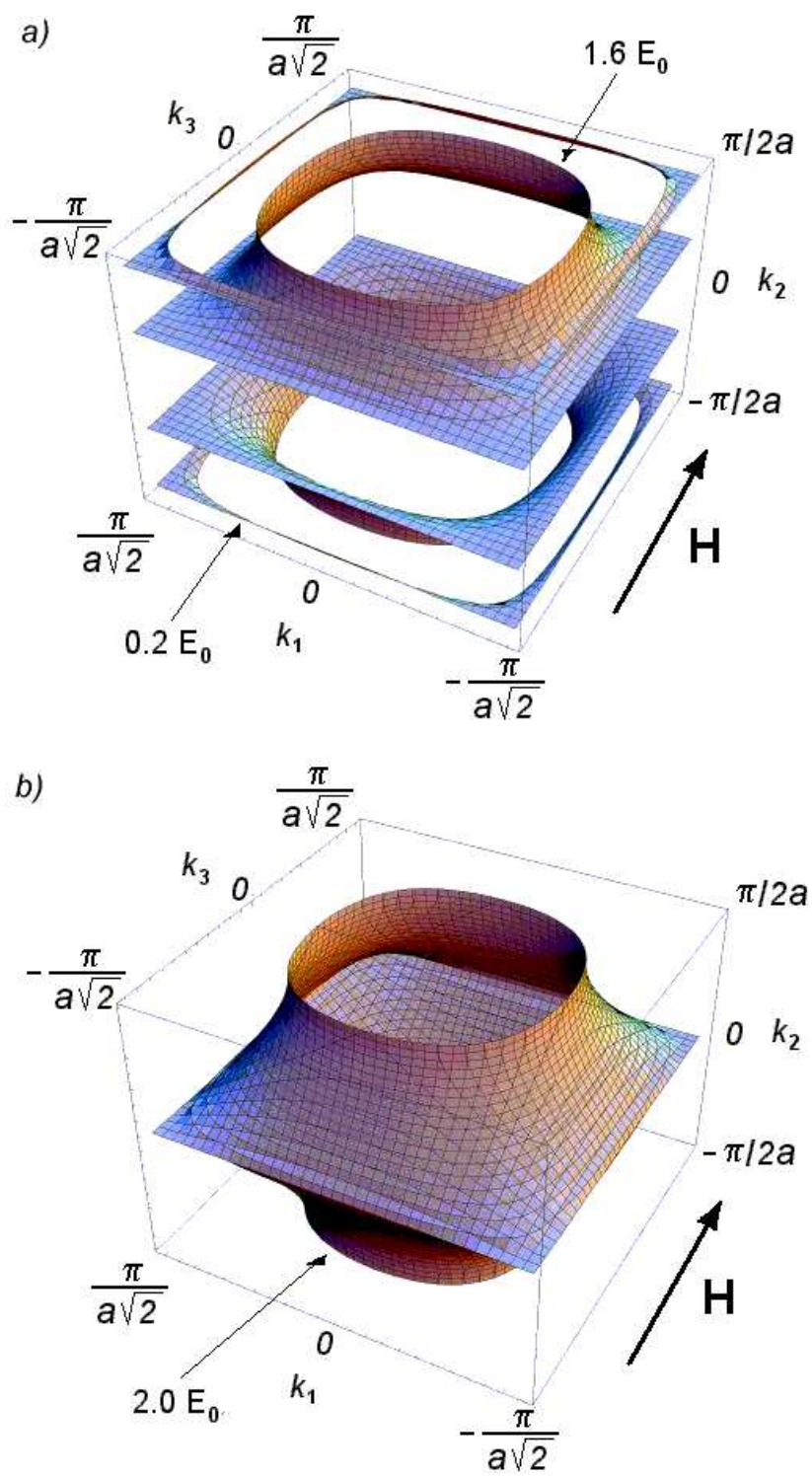


Рис. 2.4: а), б) Поверхности Ферми в первой зоне Бриллюэна при $p/q = 1/2$ и $\lambda = 0$ ($\mathbf{H} \parallel \mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2$) в верхней подзоне.

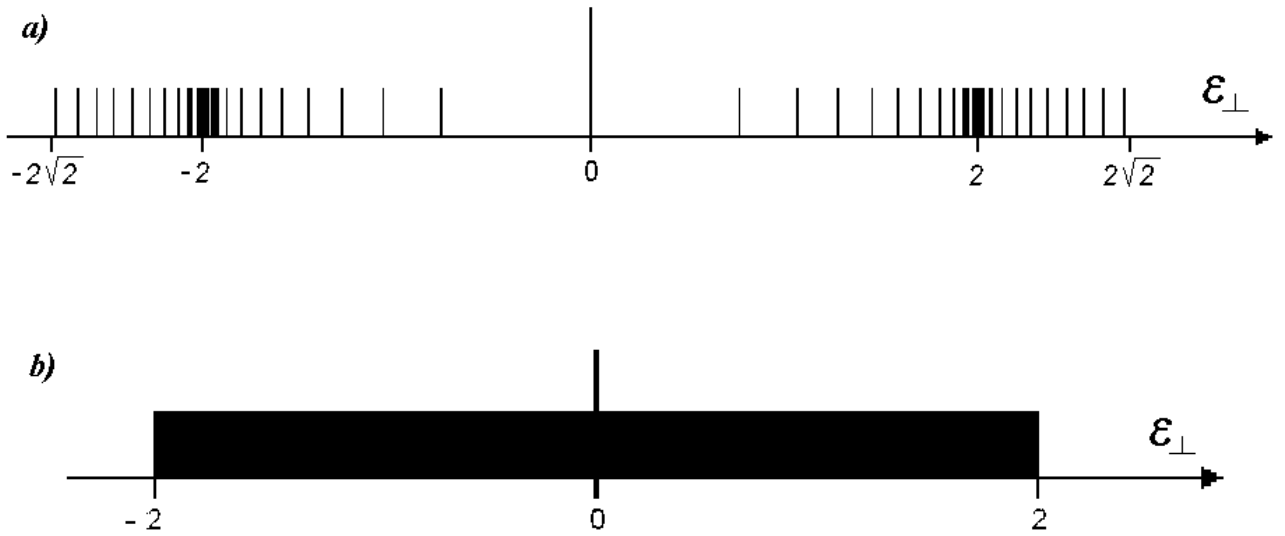


Рис. 2.5: Энергетический спектр уравнения (2.21) при $p/q = 31/60$ и (а) $\lambda = 2$; (б) $\lambda = 0$.

2.2 Приложение к одновалентным металлам с ГЦК решёткой

Поскольку в данном разделе работы изучаются квантовые состояния блоховского электрона в ГЦК решётке, определим магнитную ячейку и магнитную зону Бриллюэна для этого типа решётки. Оси декартовой системы (x, y, z) направим вдоль рёбер куба. В такой геометрии вектора, образующие элементарную ячейку, имеют координаты $(a/2, 0, a/2), (0, a/2, a/2), (a/2, a/2, 0)$. Для определённости будем рассматривать две ориентации поля: $\mathbf{H} \parallel (0, 0, 1)$ и $\mathbf{H} \parallel (1, 1, 0)$.

а. Пусть магнитное поле направлено вдоль $\mathbf{a}_3 = a(0, 0, 1)$, а векторный потенциал имеет вид $\mathbf{A} = (0, Hx, 0)$. Как следует из (1.13), при рассматриваемой ориентации поля дробь p/q есть число квантов магнитного потока через площадь $a^2/4$. Векторы, определяющие магнитные трансляции, при чётном и нечётном значении q удобно выбрать различными образом. А именно, для чётного q магнитная ячейка строит-

ся как прямоугольный параллелепипед на векторах $\mathbf{a}_{1m} = (qa/2, 0, 0)$, $\mathbf{a}_{2m} = (0, qa/2, 0)$, $\mathbf{a}_{3m} = (0, 0, a)$. Поэтому магнитная зона Бриллюэна также будет прямоугольным параллелепипедом с квадратным основанием, построенном на векторах обратной решётки $\mathbf{b}_{1m} = (2/qa, 0, 0)$, $\mathbf{b}_{2m} = (0, 2/qa, 0)$, $\mathbf{b}_{3m} = (0, 0, 2/a)$. Для нечётного q магнитная ячейка будет наклонной призмой, её базовые векторы имеют координаты $(qa/2, 0, a/2)$, $(0, qa/2, a/2)$, $(qa/2, qa/2, 0)$, что обусловлено наличием атомов в центрах граней ГЦК решётки. Заметим, что на указанных базовых векторах может быть построена ячейка Вигнера-Зейтца, обладающая всеми элементами симметрии магнитной решётки. Зона Бриллюэна при $q = 3$ для рассматриваемой ориентации магнитного поля будет построена ниже.

б. В случае, когда $\mathbf{H} \parallel \mathbf{a}_3$, где $\mathbf{a}_3 = (a/2, a/2, 0)$, удобно выбрать новую декартову систему координат, в которой ось $x_3 \parallel \mathbf{H}$, а новые координаты (x_1, x_2, x_3) связаны со старыми выражением

$$x_1 = \frac{y-x}{\sqrt{2}}, \quad x_2 = z, \quad x_3 = \frac{y+x}{\sqrt{2}}. \quad (2.24)$$

Векторный потенциал вновь выберем в калибровке Ландау: $\mathbf{A} = (-Hx_2, 0, 0)$. Как следует из (1.13), в данном случае дробь p/q есть число квантов магнитного потока через прямоугольник со сторонами $a/2\sqrt{2}$ и $a/2$, лежащий в плоскости $(x_1x_2) \perp \mathbf{H}$. Аналогично случаю **(а)**, магнитную 3D ячейку удобно строить по-разному для чётных и нечётных значений q . А именно, для чётного q она может быть выбрана в виде прямоугольного параллелепипеда, построенного на векторах, имеющих в системе (xyz) компоненты $(a/2, a/2, 0)$, $(a/2, -a/2, 0)$, $(0, 0, qa/2)$. Обратная решётка в этом слу-

чае будет прямоугольной с основными векторами $\mathbf{b}_{1m} = (2/a, 2/a, 0)$, $\mathbf{b}_{2m} = (2/a, -2/a, 0)$, $\mathbf{b}_{3m} = (0, 0, 2/qa)$. Если q нечётное, то магнитная ячейка будет наклонной призмой, построенной на базовых векторах $(a/2, a/2, 0), (a/2, -a/2, 0), (a/2, 0, qa/2)$.

2.2.1 Квантовые состояния и поверхности Ферми для ориентации поля вдоль $(0, 0, 1)$

Вывод уравнения Харпера

Волновую функцию, являющуюся собственной функцией оператора магнитной трансляции [35], для ГЦК решётки в приближении сильной связи запишем в следующем виде:

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{n,m,l} g_n(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{a}_n) \exp\left(-2\pi i \frac{p}{q} \frac{(y - ma/2)n}{a/2}\right) \times \\ \times \psi_0(x - na/2, y - ma/2, z - la/2), \quad (2.25)$$

где волновая функция $\psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{a}_n)$, описывающая s -состояния электрона в изолированном атоме, помещённом в магнитное поле, удовлетворяет уравнению Шрёдингера с атомным потенциалом $U(\mathbf{r} - \mathbf{a}_n)$. Суммирование в (2.25) ведётся по всем узлам ГЦК решётки, целые индексы (n, m, l) определяют координаты атомов кристаллической решётки. Введение фазового множителя $\exp\left(-2\pi i \frac{p}{q} \frac{(y - ma/2)n}{a/2}\right)$ в (2.25) обеспечивает правильный закон преобразования волновой функции при трансляциях, сформулированный в главе 1. Коэффициенты g_n описывают распределение по узлам магнитной ячейки.

Получим теперь систему уравнений для коэффициентов g_n . Для этого подставим функцию (2.25) в уравнение Шрёдингера с гамильтонианом $\hat{H} = \frac{1}{2m} (\mathbf{p} - \frac{\epsilon}{c} \mathbf{A})^2 + V(\mathbf{r})$, где $V(\mathbf{r})$ - кристаллический потенциал.

Действуя в духе метода сильной связи, вычисляем интегралы перекрытия между соседними узлами, получая при этом систему разностных уравнений на коэффициенты $g_n(\mathbf{k})$. Интеграл перекрытия между соседними узлами в плоскости (xy) в присутствии магнитного поля имеет вид

$$A = \int \exp\left(\pm 2\pi i \frac{p}{q} \frac{(y - (m \pm 1/2)a/2 \pm (n \pm 1/2)a/2)}{a/2}\right) \times \\ \times \psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{a}_n^{xy}) \times (V(\mathbf{r}) - U(\mathbf{r} - \mathbf{a}_n)) \psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{a}_n) d\tau, \quad (2.26)$$

где $\mathbf{a}_n^{xy} = ((n \pm 1)a/2, (m \pm 1)a/2, la/2)$. Очевидно, что в интеграле (2.26) существенна узкая область максимального перекрытия волновых функций, расположенная в точках $x = (n \pm 1/2)a/2$, $y = (m \pm 1/2)a/2$. Подставляя в фазовый множитель под знаком интеграла это значение y , мы получим $A = \exp\left(\pm 2\pi i \frac{p}{q} (n \pm 1/2)\right) \alpha$, где α есть значение интеграла перекрытия в отсутствие магнитного поля. Необходимо иметь в виду также, что в интеграл (2.26) входят атомные волновые функции в присутствии магнитного поля. Поэтому константа в интеграле перекрытия также должна отличаться от своего значения при $\mathbf{H} = 0$. Можно ожидать, что изменение формы атомной функции будет существенным в таких магнитных полях, когда циклотронная частота в плоскости, перпендикулярной \mathbf{H} , много больше характерной атомной частоты. В магнитном поле $H \approx 30$ МГц значение $\omega_c \approx 5 \times 10^{14} c^{-1}$, т.е. энергия $\hbar\omega_c$ много меньше расстояния между атомными уровнями. Поэтому можно ожидать, что в таких полях форма функции ψ_0 и, следовательно, интегралы перекрытия не будут сильно отличаться от полученного выше значения. Легко убедиться также, что зеемановское

расщепление в магнитных полях $H \approx 10^7 \text{ Гс}$ также будет много меньше характерной атомной энергии. Это значит, что положение центров энергетических зон по сравнению со случаем $\mathbf{H} = 0$ изменится незначительно.

В плоскости (xz) интеграл перекрытия будет равен

$$B = \int \exp\left(\pm 2\pi i \frac{p}{q} \frac{(y - ma/2)}{a/2}\right) \psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{a}_n^{xz}) \times \\ \times (V(\mathbf{r}) - U(\mathbf{r} - \mathbf{a}_n)) \psi_0(\mathbf{r} - \mathbf{a}_n) d\tau, \quad (2.27)$$

где $\mathbf{a}_n^{xz} = ((n \pm 1)a/2, ma/2, (l \pm 1)a/2)$. Аналогично предыдущему случаю, положим $y = ma/2$ и получим, что $B = \alpha$. Наконец, интеграл перекрытия между атомами в плоскости (yz) можно представить в виде $C = \exp\left(\pm 2\pi i \frac{p}{q} n\right) \alpha$. Подобным образом могут быть проведены вычисления и для второй группы ближайших соседей, расположенных в точках $(a, 0, 0)$, $(0, a, 0)$, $(0, 0, a)$ и т.д [35]. Интеграл перекрытия между волновыми функциями для этой группы соседей в отсутствие магнитного поля обозначим через r . Известно, что для большинства металлов (Cu, Ag, Au, Al) отношение $\frac{r}{\alpha} \ll 1$ [67].

Окончательно с учётом (2.26) - (2.27) уравнение для коэффициентов g_n в рассматриваемой ориентации магнитного поля примет вид:

$$2\alpha \left[g_{n-1} e^{-i \frac{k_x a}{2}} \left(\cos\left(\frac{k_y a}{2} + 2\pi \frac{p}{q} \left[n - \frac{1}{2}\right]\right) + \cos\frac{k_z a}{2} \right) + \right. \\ \left. + g_{n+1} e^{i \frac{k_x a}{2}} \left(\cos\left(\frac{k_y a}{2} + 2\pi \frac{p}{q} \left[n + \frac{1}{2}\right]\right) + \cos\frac{k_z a}{2} \right) + \right. \\ \left. + 2 \cos\frac{k_z a}{2} \cos\left(\frac{k_y a}{2} + 2\pi \frac{p}{q} n\right) g_n \right] + \\ + r \left[g_{n-2} e^{-ik_x a} + g_{n+2} e^{ik_x a} + 2 \left(\cos\left(k_y a + 4\pi \frac{p}{q} n\right) + \cos k_z a \right) g_n \right] = \\ = -\varepsilon g_n. \quad (2.28)$$

Необходимо отметить, что в отличие от стандартного уравнения Харпера [1], в разностном уравнении (2.28) имеет место модуляция как диагональных, так и околodiагональных членов, а также то, что при учёте взаимодействия со следующей группой ближайших соседей ($r \neq 0$) система (2.28) является пятидиагональной. Заметим также, что в отличие от стандартного уравнения Харпера система (2.28) не обладает симметрией по отношению к замене $\varepsilon \rightarrow -\varepsilon$. Компоненты квазиимпульса (k_x, k_y, k_z) здесь изменяются в магнитной зоне Бриллюэна, описанной в пункте 2(а).

Заметим, что волновая функция (2.25) с коэффициентами g_n , удовлетворяющими системе (2.28), описывает распределение электронной плотности, обладающее трансляционной инвариантностью только по отношению к магнитным трансляциям и неоднородное внутри магнитной ячейки. Однако, в реальных кристаллах вследствие кулоновского взаимодействия распределение электронной плотности может быть неоднородным лишь в пределах одной элементарной ячейки кристалла. Для того, чтобы плотность вероятности была однородна внутри магнитной ячейки, необходимо взять линейную комбинацию функций (2.25), воспользовавшись вырожденностью уравнения (2.28) по квантовому числу k_y . Такие функции, очевидно, будут правильными функциями нулевого приближения по кулоновскому взаимодействию. Соответствующие расчёты полностью аналогичны проделанным в [35] для простой кубической решётки.

В отсутствие магнитного поля ($p/q = 0$) из системы (2.28) следует

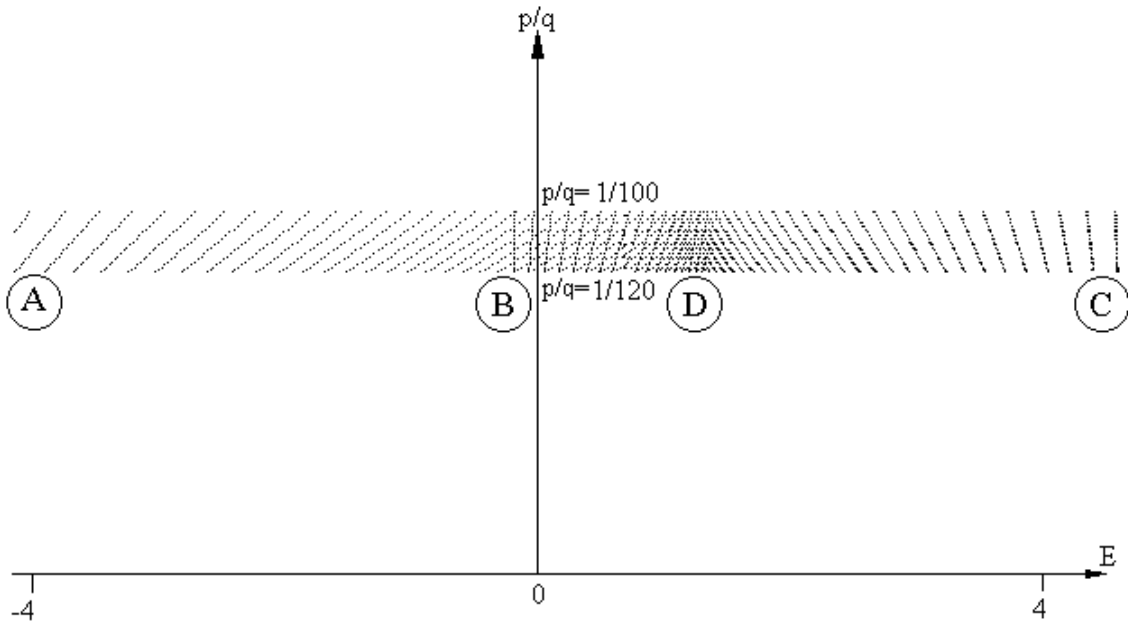


Рис. 2.6: Магнитные подзоны (уровни Ландау) в ГЦК решётке в слабом магнитном поле $\mathbf{H} \parallel (0, 0, 1)$ при $k_z = 3\pi/4a$.

стандартный закон дисперсии для ГЦК решётки при $\mathbf{H} = 0$ [67, 68]

$$\varepsilon(\mathbf{k}) = -4\alpha \left(\cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_y a}{2} + \cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_z a}{2} + \cos \frac{k_y a}{2} \cos \frac{k_z a}{2} \right) - 2r (\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a). \quad (2.29)$$

Обсудим сначала энергетический спектр, определяемый системой (2.28) при $r = 0$, в области слабых магнитных полей $p/q \ll 1$ и сравним результат с квазиклассическим приближением Онзагера - Лифшица [64]. Для этого найдём спектр системы (2.28) при фиксированном k_z , параллельном \mathbf{H} . На рис.2.6 представлен фрагмент спектра, определяемый (2.28), при значении $k_z = \frac{3\pi}{4a}$. Сразу же отметим, что в слабом магнитном поле энергия практически не зависит от k_x и k_y , т.е. спектр состоит из узких зон. Другими словами, уровни Ландау здесь практически не уширяются.

Одновременно на рис.2.7 показаны сечения той же плоскостью $k_z = \frac{3\pi}{4a}$ семейства изоэнергетических поверхностей, определяемых (2.29). Именно эти сечения дают квазиклассические траектории и дискретный спектр Онзагера - Лифшица при $k_z = \frac{3\pi}{4a}$. На рис. 2.6 видно не-

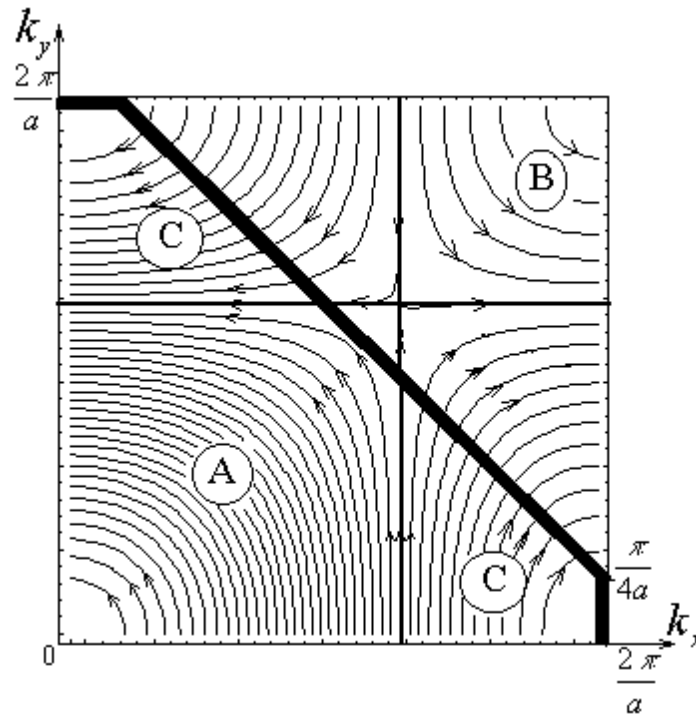


Рис. 2.7: Сечения семейства изоэнергетических поверхностей, определяемых (2.29), плоскостью $k_z = 3\pi/4a$ при $r = 0$. Жирная линия обозначает границу первой зоны Бриллюэна, а стрелки показывают направление вращения в магнитном поле.

сколько последовательностей уровней (узких магнитных подзон), которые можно сопоставить различным квазиклассическим траекториям. Энергетический спектр в областях А, В и С на рис.2.6 соответствует траекториям А, В и С на рис.2.7. В областях А и В на рис.2.7 траектории имеют электронный характер, а в области С – дырочный. На рис. 2.6 этому отвечает различный наклон уровней (как функции магнитного потока) в областях А, В и С. Область сгущения уровней на рис.2.6 (область D) отвечает сепаратрисе на рис.2.7. Можно убедиться, что расстояния между уровнями на рис.2.6 полностью соответствуют значениям, получаемым при квантовании Онзагера - Лифшица.

Закон дисперсии, магнитная зона Бриллюэна и поверхность Ферми при $p/q = 1/2$

При $p/q = 1/2$ спектр находится из условия обращения в нуль детерминанта второго порядка системы (2.28). В этом случае энергия в верхней и нижней подзонах определяется выражением

$$\varepsilon_{1,2} = \pm 4\alpha \sqrt{\sin^2 \frac{k_x a}{2} \sin^2 \frac{k_y a}{2} + \cos^2 \frac{k_z a}{2} \left(\cos^2 \frac{k_x a}{2} + \cos^2 \frac{k_y a}{2} \right)} - 2r (\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a). \quad (2.30)$$

Она заключена в интервалах: $\varepsilon_1 \in [-2r \dots 4\alpha\sqrt{2} + 6r]$ и $\varepsilon_2 \in [-4\alpha\sqrt{2} - 6r \dots 2r]$, т.е. в области $[-2r \dots 2r]$ имеет место перекрытие зон, обусловленное учётом второй группы ближайших соседей в решётке. При $r = 0$ имеется лишь касание зон в точке $\varepsilon = 0$. Таким образом, второе слагаемое в законах дисперсии (2.29) и (2.30) становится существенным при наличии в спектре особенностей корневого типа в области $\varepsilon = 0$. При данной ориентации магнитного поля подобная ситуация имеет место при всех чётных знаменателях дроби p/q . Как следует из изложенного выше, при $p/q = 1/2$ в рассматриваемой ориентации магнитного поля зона Бриллюэна представляет собой куб, построенный на векторах $(2\pi/a, 0, 0)$, $(0, 2\pi/a, 0)$, $(0, 0, 2\pi/a)$. Как и следовало ожидать, функция (10) периодична в этой области. Отметим, что объём магнитной зоны Бриллюэна равен $1/q^2 = 1/4$ от объёма исходной зоны Бриллюэна при $\mathbf{H} = 0$, причём все состояния в магнитной зоне двукратно вырождены по k_y .

Уровень Ферми и поверхность Ферми в магнитном поле могут быть найдены из условия, что в одновалентном металле электроны (с учётом спина) занимают объём, равный половине объёма исходной зоны Бриллюэна.

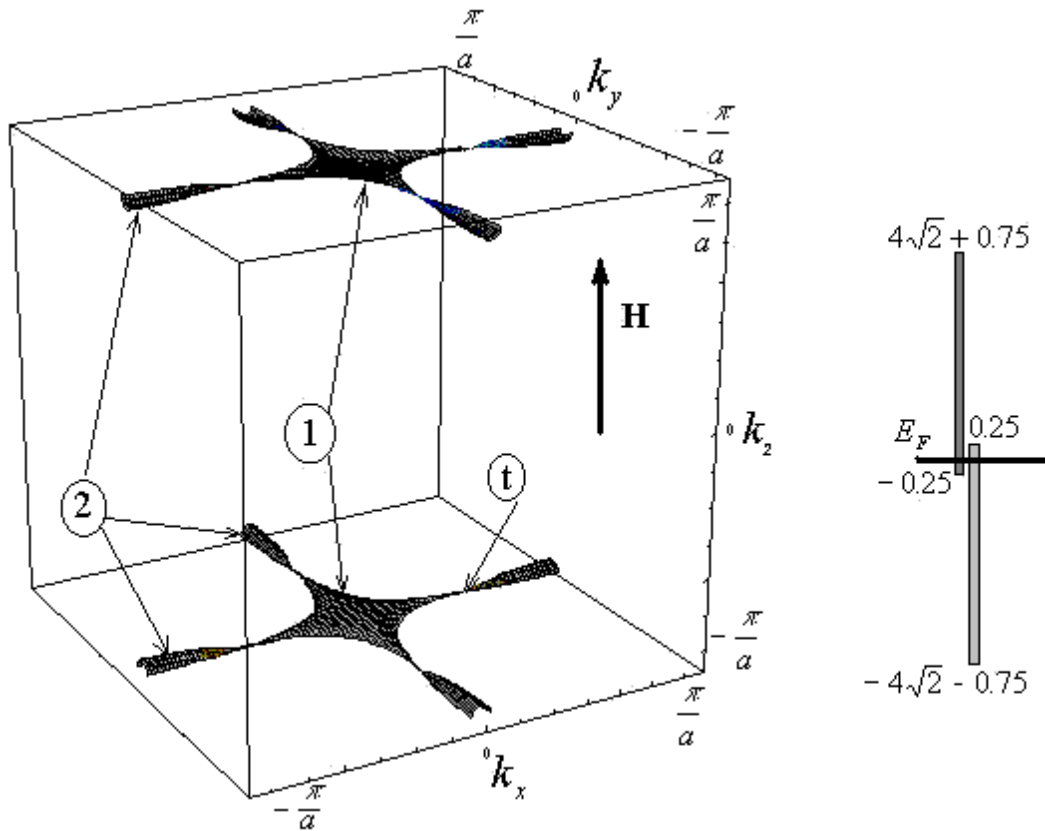


Рис. 2.8: Электронные (1) и дырочные (2) поверхности Ферми для одновалентного металла при $p/q = 1/2$ и $\mathbf{H} \parallel (0, 0, 1)$. В точке (t) и эквивалентных ей имеет место самопересечение. Справа показана схема перекрывающихся магнитных подзон и положение уровня Ферми $E_F = 0$. Энергия измеряется в единицах α .

люэна. Это можно сделать, вычисляя с помощью (2.30) объём в \mathbf{k} -пространстве, занимаемый электронами с энергией, не превосходящей заданную. Результаты такого расчёта для $r/\alpha = 1/8$, $\mathbf{H} \parallel (0, 0, 1)$ и $p/q = 1/2$ представлены на рис.2.8.

Как следует из рисунка, уровень Ферми лежит в области перекрытия зон. Поверхность Ферми состоит из двух типов полостей: электронных (полости (1)) в верхней магнитной подзоне и дырочных (полости (2)) в нижней подзоне. Поскольку область перекрытия подзон мала, что связано с условием $r \ll \alpha$, объёмы полостей, занятых электронами и дырками, составляют малую часть зоны Бриллюэна. Таким образом,

при $p/q = 1/2$ одновалентный металл с ГЦК решёткой превращается в полуметалл, а при $r = 0$ – в диэлектрик. В точке (t) с координатами $k_x = \pi/2a$, $k_y = 0$, $k_z = -\pi/a$ и эквивалентных ей, как это следует из (2.30) и рис.2.8, имеет место самопересечение электронных и дырочных полостей. По-видимому, в этом случае может наблюдаться магнитный пробой.

Поверхность Ферми для $p/q = 1/3$.

Если магнитный поток p/q через площадь $a^2/4$ равен $1/3$, то спектр определяется из условия обращения в нуль детерминанта системы (2.28) третьего порядка. При этом в (2.28) можно положить $r = 0$, т.к. учёт второго слагаемого в (2.29) необходим лишь в областях малого перекрытия подзон. Между тем, как мы увидим ниже, в рассматриваемом случае уровень Ферми лежит далеко от края зоны. Трём корням кубического уравнения соответствуют три магнитные подзоны, определяемые выражениями

$$\varepsilon_1 = 2s \cos \left(\frac{1}{3} \arccos \frac{t}{s^3} \right) \quad (2.31)$$

$$\varepsilon_2 = -2s \cos \left(\frac{\pi}{3} + \frac{1}{3} \arccos \frac{t}{s^3} \right) \quad (2.32)$$

$$\varepsilon_3 = -2s \cos \left(\frac{\pi}{3} - \frac{1}{3} \arccos \frac{t}{s^3} \right), \quad (2.33)$$

где энергия измеряется в единицах α , $s = \sqrt{6 + 4 \cos k_z a}$, а

$$t = -\cos \frac{3(k_y - k_z)a}{2} - \cos \frac{3(k_y + k_z)a}{2} - 12(1 + \cos k_z a) - 2 \cos \frac{3k_x a}{2} \left(\cos \frac{3k_z a}{2} - \cos \frac{3k_y a}{2} \right).$$

Взаимное расположение магнитных подзон показано в правой части рис.2.9. В соответствии с изложенным в разделе 2, магнитная зона

Бриллюэна представляет собой усечённый параллелепипед, построенный на векторах $\frac{2\pi}{3a}(1, 1, 3)$, $\frac{2\pi}{3a}(1, -1, -3)$, $\frac{2\pi}{3a}(-1, -1, 3)$ и заключённый в параллелепипед $-2\pi/3a \leq k_x \leq 2\pi/3a$, $-2\pi/3a \leq k_y \leq 2\pi/3a$, $-2\pi/a \leq k_z \leq 2\pi/a$ (см. рис.2.9). Её объём составляет $1/q^2 = 1/9$ часть от объёма первой зоны при $\mathbf{H} = 0$, а все состояния трёхкратно вырождены по k_y . Функции, определяемые (2.31)-(2.33), периодичны в указанной зоне Бриллюэна.

Уровень Ферми может быть найден так же, как и для случая $p/q = 1/2$. Он расположен в средней зоне, определяемой (2.32), при $E_F \approx 1.58$; соответствующая поверхность Ферми изображена на рис.4. Необходимо отметить, что она состоит из двух полостей, имеющих электронный характер: (1), которые можно назвать "холмами" (внизу) и "впадинами" (вверху) и эллипсоидальными полостями (2). Электроны заполняют области, расположенные между верхней и нижней границами зоны Бриллюэна и полостями (1), а также между боковыми гранями зоны Бриллюэна и полостями типа (2). В отличие от чётных значений знаменателя дроби p/q , здесь заполнена значительная часть зоны Бриллюэна: в областях показанных на рис.2.9, находится $1/3$ от общего числа электронов. Таким образом, одновалентный металл с ГЦК решёткой при $p/q = 1/3$ остаётся типичным металлом.

Обсудим также характер спектра при значениях магнитного потока, близких к $1/3$:

$$\frac{p}{q} = \frac{1}{3} + \frac{1}{q'}, \quad q' \gg 1. \quad (2.34)$$

Выше было показано, что в слабых полях $p/q \ll 1$ закон квантования, определяемый системой (2.28), идентичен квазиклассическим правилам квантования Онзагера - Лифшица.

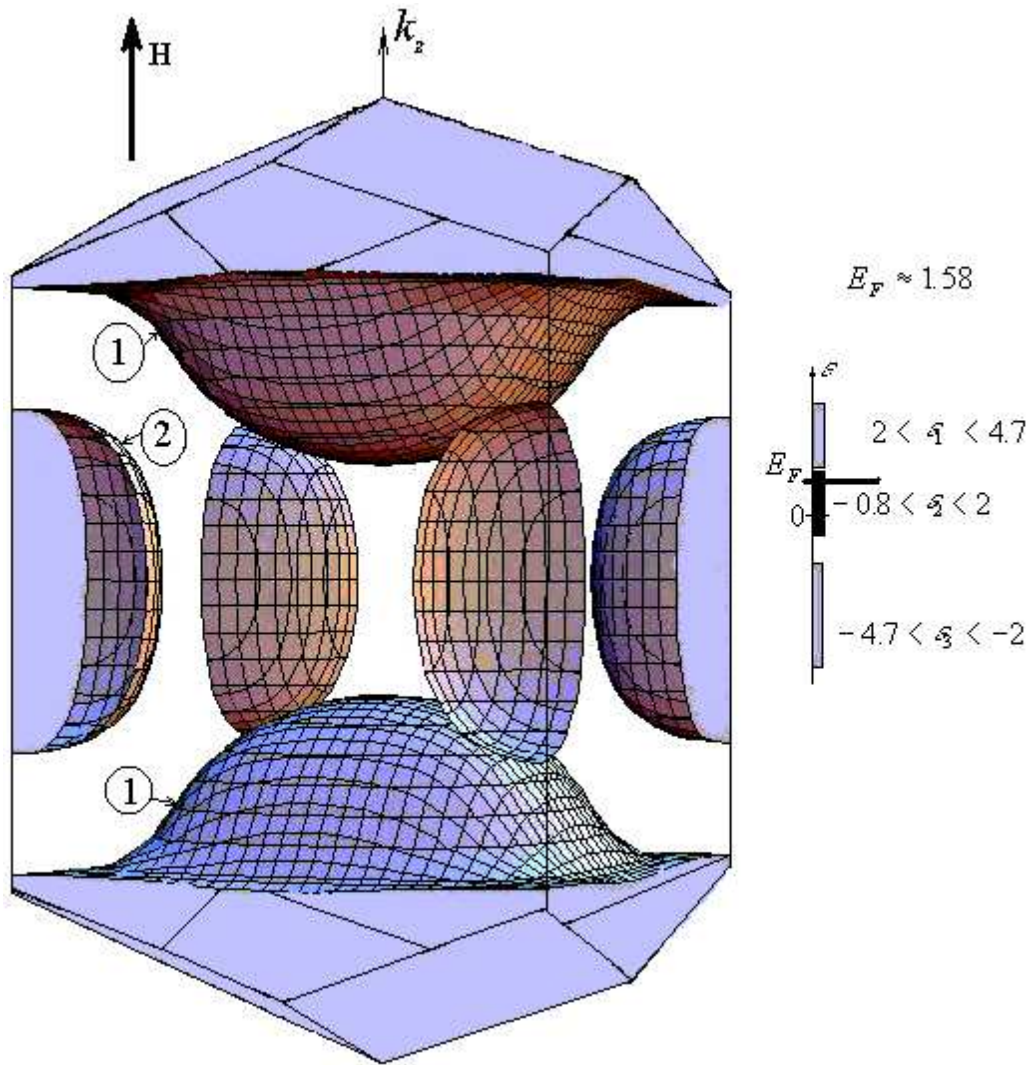


Рис. 2.9: Два типа электронных поверхностей Ферми для одновалентного металла при $p/q = 1/3$ и $\mathbf{H} \parallel (0, 0, 1)$: (1) - "холмы" и "впадины", (2) - поверхности эллипсоидального типа.

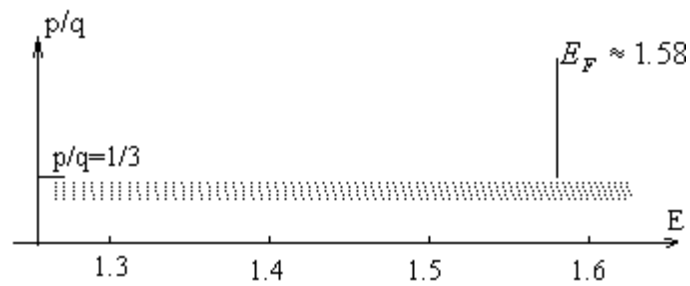


Рис. 2.10: Фрагмент спектра в ГЦК решётке в магнитном поле $\mathbf{H} \parallel (0, 0, 1)$ в области p/q , близком к $1/3$, при $k_z = 0$ и $k_x = k_y = 0$. Показано положение уровня Ферми.

В области p/q , определяемой (2.34), также можно убедиться в том, что эти два способа расчёта приводят к одинаковому результату. Так, на рис.2.10 показан фрагмент спектра при $k_z = 0$ для зоны, в которой лежит уровень Ферми. Заметим, что при $q' \gg 1$ магнитные подзоны очень узкие и выглядят как система практически дискретных уровней. Из рис.2.10 видно, что экстремальному сечению соответствует последовательность эквидистантных уровней в области E_F . Расстояние между ними хорошо согласуется с тем значением, которое можно получить, применяя правила квантования Онзагера - Лифшица к спектру (2.32) при $k_z = 0$.

2.2.2 Квантовые состояния и поверхности Ферми для ориентации поля вдоль $(1, 1, 0)$

Рассмотрим теперь случай, когда поле $\mathbf{H} \parallel \mathbf{a}_3$, где $\mathbf{a}_3 = (a/2, a/2, 0)$. Аналогично разделу 3.1, волновую функцию в приближении сильной связи можно записать в форме (2.25) с новым фазовым множителем

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{n,m,l} g_n(\mathbf{k}) \exp(i\mathbf{k}\mathbf{a}_n) \exp\left(2\pi i \frac{p}{q} \frac{(x_1 - ma/2\sqrt{2})}{a/2\sqrt{2}} n\right) \times \\ \times \psi_0(x_1 - ma/2\sqrt{2}, x_2 - na/2, x_3 - la/2\sqrt{2}), \quad (2.35)$$

где целые индексы (n, m, l) определяют координаты атомов кристаллической решётки. Вычисление интегралов перекрытия в плоскостях (x_1x_3) , (x_1x_2) и (x_2x_3) приводит к следующей системе разностных уравнений для коэффициентов g_n :

$$4\alpha \left[\cos \frac{k_3 a}{2\sqrt{2}} \left(g_{n-1} \exp(-ik_2 a/2) \cos \left(\frac{k_1 a}{2\sqrt{2}} + 2\pi \frac{p}{q} \left[n - \frac{1}{2} \right] \right) + \right. \right. \\ \left. \left. + g_{n+1} \exp(ik_2 a/2) \cos \left(\frac{k_1 a}{2\sqrt{2}} + 2\pi \frac{p}{q} \left[n + \frac{1}{2} \right] \right) \right) \right] +$$

$$+ \frac{1}{2} \left(\cos \frac{k_3 a}{\sqrt{2}} + \cos \left(\frac{k_1 a}{\sqrt{2}} + 4\pi \frac{p}{q} n \right) \right) g_n \Big] + (2.36)$$

$$+ r \left[g_{n-2} e^{-ik_2 a} + g_{n+2} e^{ik_2 a} + 4 \cos \frac{k_3 a}{\sqrt{2}} \cos \left(\frac{k_1 a}{\sqrt{2}} + 4\pi \frac{p}{q} n \right) g_n \right] = -\varepsilon g_n.$$

По форме система (2.36) совпадает с системой (2.28). Компоненты квазимпульса (k_1, k_2, k_3) пробегает все значения в магнитной зоне Бриллюэна, определённой в пункте 2(б). Следует отметить, что в рассматриваемой ориентации, так же как и в случае $\mathbf{H} \parallel (0, 0, 1)$, система (2.36) остаётся пятидиагональной, а при $r = 0$ – трёхдиагональной, что обеспечено оптимальным выбором калибровки векторного потенциала. Укажем на следующие интересные особенности решений системы (2.36). Легко видеть, что решения при чётном q двукратно вырождены: энергии ε_n отвечают функции $\{g_n\}$ и $\{(-1)^n g_{n+q/2}\}$. Кроме этого, так же как и в стандартном уравнении Харпера, при $k_1 = k_2 = 0$ система (2.36) инвариантна относительно замены $n \rightarrow q - n$. Это свойство симметрии волновых функций отражено ниже на рис.2.16, 2.18, где представлены собственные функции (2.36). Имеет место также симметрия $k_3 \rightarrow -k_3$, как и в отсутствие магнитного поля.

При $p/q = 1/2$ из (2.36) следует спектр в двух магнитных подзонах:

$$\varepsilon_{1,2} = \pm 8\alpha \left| \sin \frac{k_1 a}{2\sqrt{2}} \sin \frac{k_2 a}{2} \cos \frac{k_3 a}{2\sqrt{2}} \right| - 2\alpha \left(\cos \frac{k_1 a}{\sqrt{2}} + \cos \frac{k_3 a}{\sqrt{2}} \right). \quad (2.37)$$

Здесь мы положили $r = 0$, т.к. уровень Ферми, как это будет видно ниже, расположен далеко от краёв зон в области их сильного перекрытия. Энергия, определяемая (gs110ab), заключена в интервалах: $\varepsilon_1 \in [-4\alpha, (4\sqrt{2} + 2)\alpha]$ и $\varepsilon_2 \in [-(4\sqrt{2} + 2)\alpha, 4\alpha]$, т.е. имеет место сильное перекрытие магнитных подзон, даже при учёте лишь первой груп-

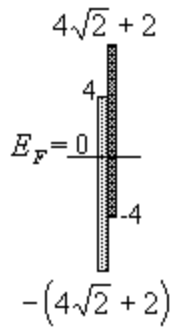


Рис. 2.11: Схема магнитных подзон и положение уровня Ферми, соответствующие верхней и нижней магнитным подзонам (2.37) для одновалентного металла при $\mathbf{H} \parallel (1, 1, 0)$ и $p/q = 1/2$.

пы ближайших соседей (см. схему расположения магнитных подзон на рис.2.11). Можно утверждать, что в отличие от двумерного случая, где магнитные подзоны либо касаются, либо разделены запрещёнными интервалами, в трёхмерной задаче при наличии зависимости энергии от трёх проекций квазиимпульса зоны, как правило, перекрываются. Поэтому касание энергетических зон при чётных q , обсуждавшееся в разделе 3.2, является скорее исключением из общего правила.

На рис.2.12,2.13 изображены поверхности Ферми для одновалентного металла при $p/q = 1/2$: на рис.2.12 показана электронная поверхность Ферми в верхней магнитной подзоне, а на рис.2.13 – дырочные поверхности Ферми в нижней подзоне. Поскольку в рассматриваемой ориентации \mathbf{H} область перекрытия двух магнитных подзон не является малой, поверхности на рис.2.12-2.13 занимают значительную часть зоны Бриллюэна. Из этого следует, что одновалентный металл с ГЦК решёткой при данной ориентации поля и $p/q = 1/2$, в отличие от случая $\mathbf{H} \parallel (0, 0, 1)$, остаётся типичным металлом. Как это следует из (2.37) и рис.2.12-2.13, в плоскостях, где выражение под знаком модуля в (2.37) обращается в нуль, имеет место касание электронной и дырочной полостей.

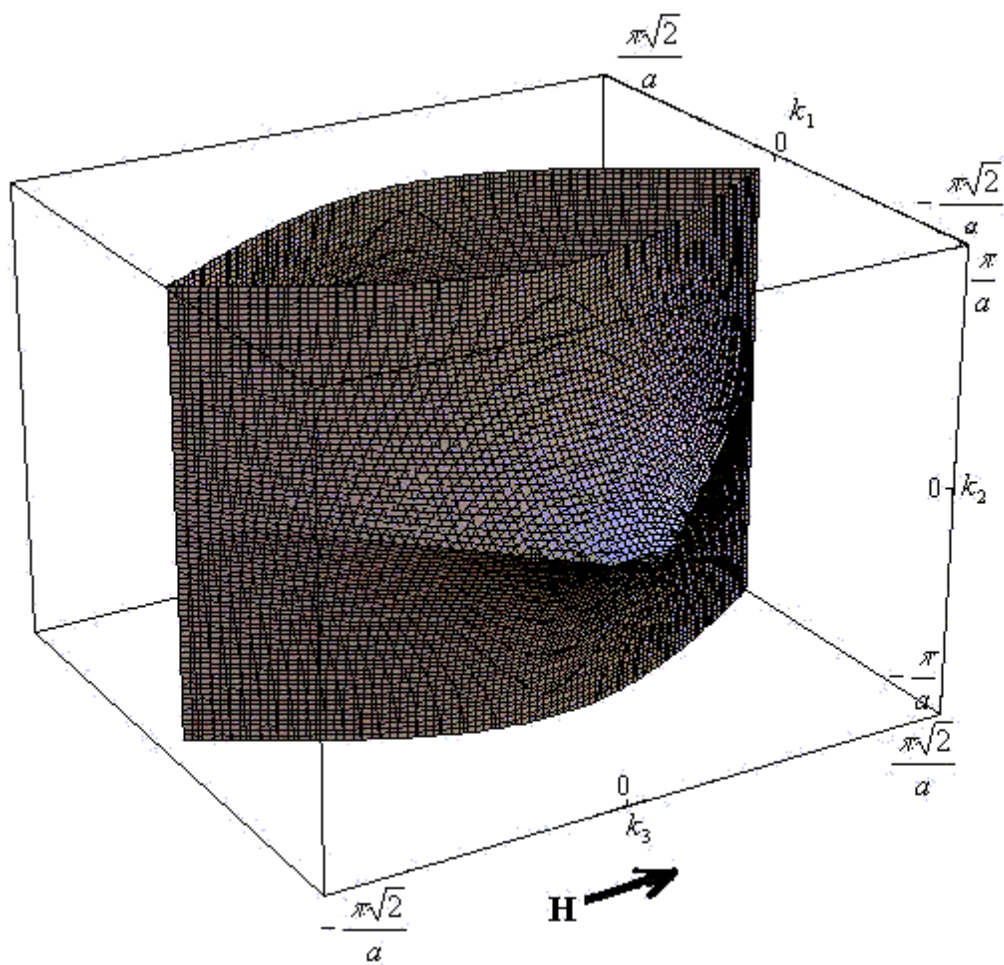


Рис. 2.12: Электронная поверхность Ферми, соответствующая верхней магнитной подзоне (2.37), для одновалентного металла при $\mathbf{H} \parallel (1, 1, 0)$ и $p/q = 1/2$.

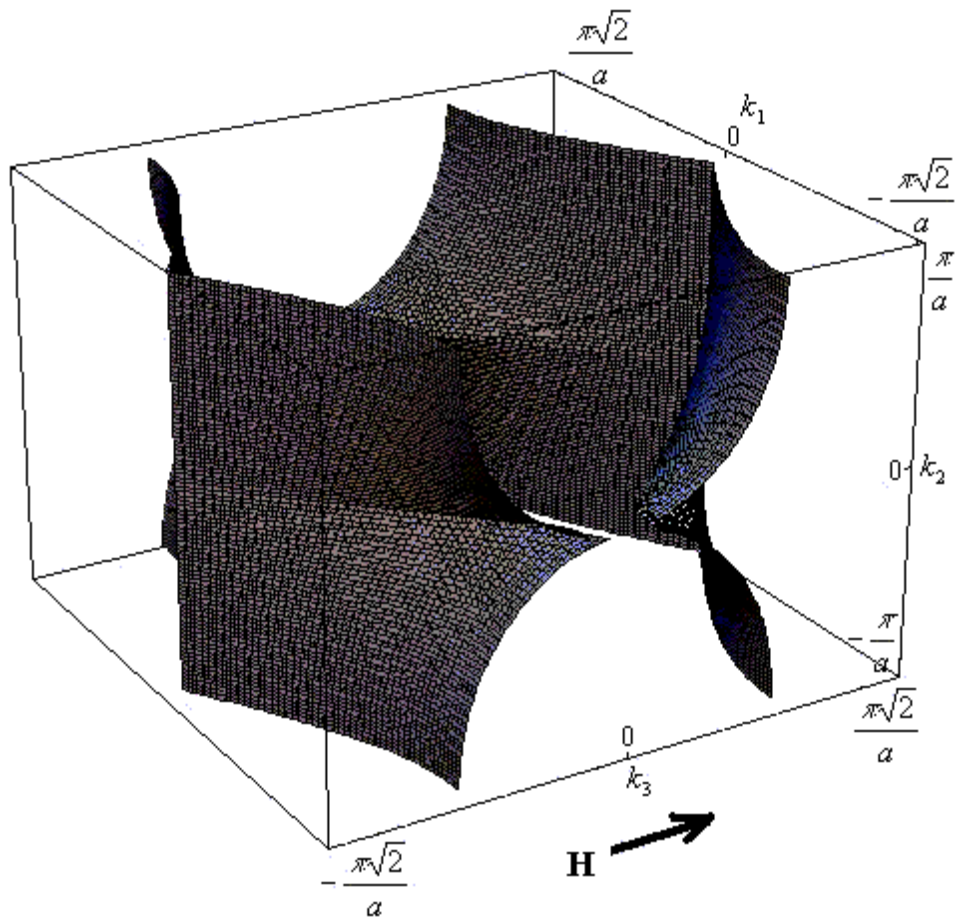


Рис. 2.13: Дырочная поверхность Ферми, соответствующая нижней магнитной подзоне (2.37, для одновалентного металла при $\mathbf{H} \parallel (1, 1, 0)$ и $p/q = 1/2$.



Рис. 2.14: Спектр системы (2.36) при $\mathbf{H} \parallel (1, 1, 0)$, $p/q = 51/100$ и сечении $k_3 = 0$. Цифрами отмечены: 1 - уровень Ферми; 2 - уровни в области открытых траекторий вблизи дна верхней магнитной подзоны (2.37); 3 - уровни в области замкнутых траекторий вблизи по:

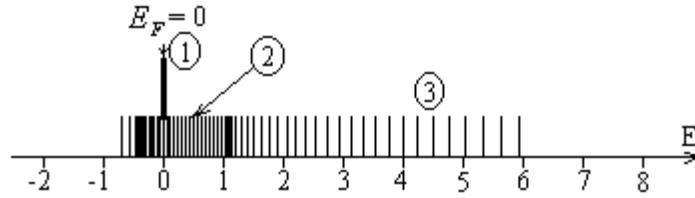


Рис. 2.15: Спектр системы (2.36) при $\mathbf{H} \parallel (1, 1, 0)$, $p/q = 51/100$ и сечении $k_3 = \frac{4\pi\sqrt{2}}{5a}$. Цифрами отмечены: 1 - уровень Ферми; 2 - уровни в области открытых траекторий; 3 - уровни в области замкнутых траекторий из верхней магнитной подзоны (2.37).

Обсудим теперь спектр системы (2.36) при значениях магнитного потока, мало отличающегося от $1/2$: $p/q = 1/2 + 1/q'$, где $q' \gg 1$. Здесь необходимо обратить внимание на структуру магнитных подзон в области энергий, которая в квазиклассическом приближении соответствует открытым орбитам. Удобно построить спектр энергий при фиксированном значении k_3 . Такой спектр при значении $p/q = 51/100$ и $k_1 = k_2 = 0$ показан на рис. 2.14 (сечение $k_3 = 0$) и рис. 2.15 (сечение $k_3 = 4\pi\sqrt{2}/5a$). На рис. 2.16 и 2.17 приведены несколько собственных функций для уровней, представляющих ту или иную область спектра: функции (1) соответствуют уровню Ферми, (2) - открытым траекториям и (3) - замкнутым орбитам. Сравнивая рис.2.14 и 2.15, можно заметить, что при приближении сечения $k_3 = const$ к границе зоны Бриллюэна доля значений энергии в непрерывном спектре возрастает, как это и следует из закона дисперсии (2.37) и рис.2.12-2.13, где $p/q = 1/2$.

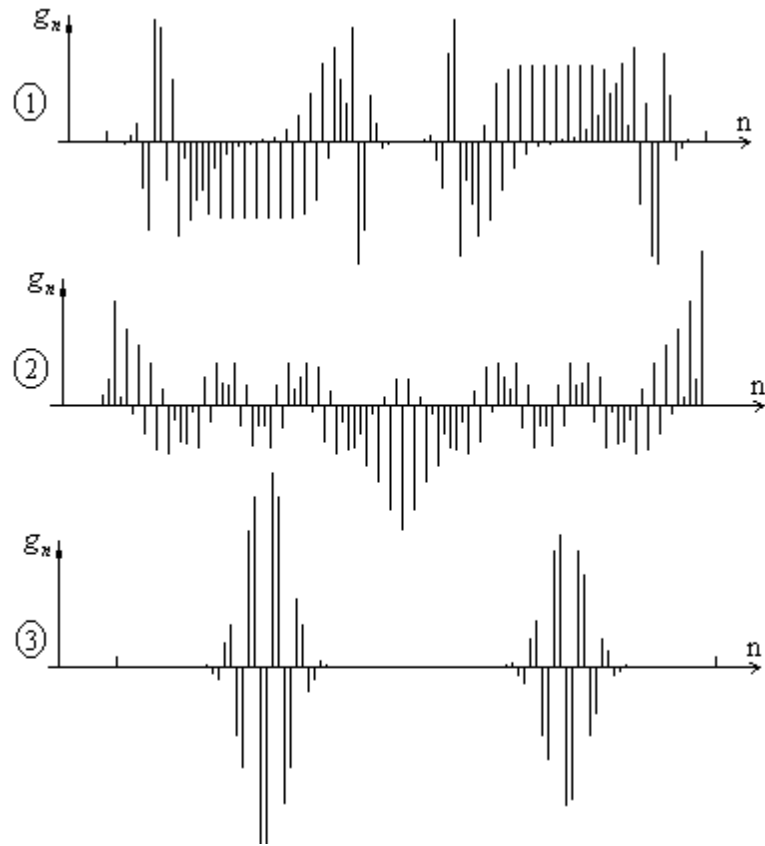


Рис. 2.16: Компоненты собственного вектора системы (2.36) при $\mathbf{H} \parallel (1, 1, 0)$, $p/q = 51/100$ и сечении $k_3 = 0$, соответствующие энергетическим уровням, выделенным на рис.2.14, для значений $k_1 = k_2 = 0$.

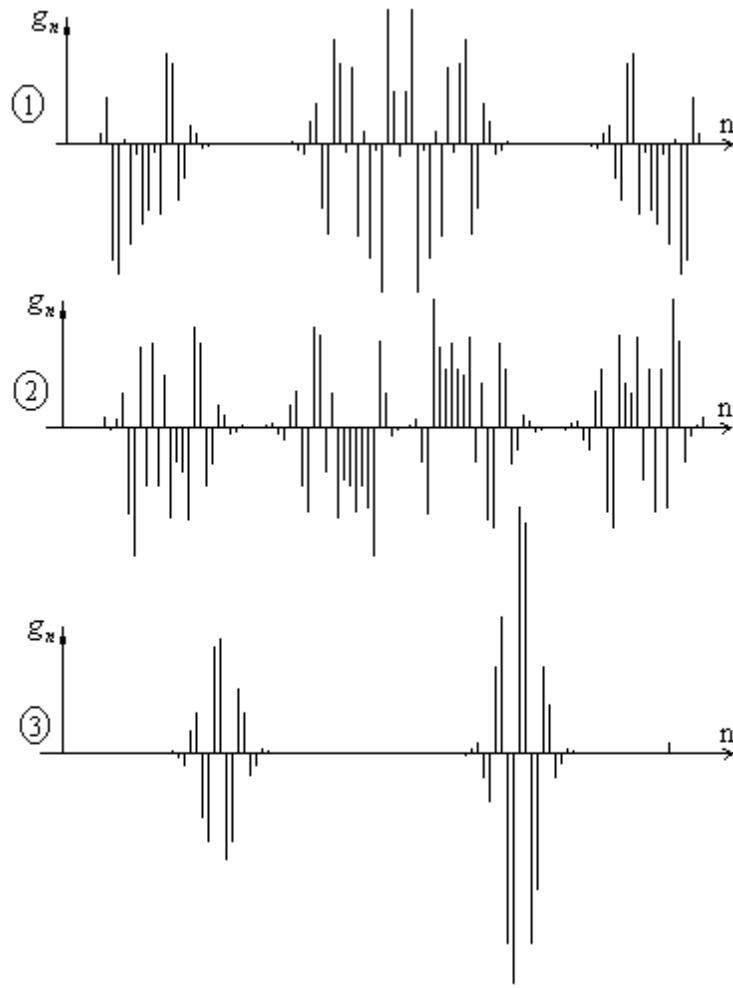


Рис. 2.17: Компоненты собственного вектора системы (2.36) при $\mathbf{H} \parallel (1, 1, 0)$, $p/q = 51/100$ и сечении $k_3 = \frac{4\pi\sqrt{2}}{5a}$, соответствующие энергетическим уровням, выделенным на рис.2.15, для значений $k_1 = k_2 = 0$.

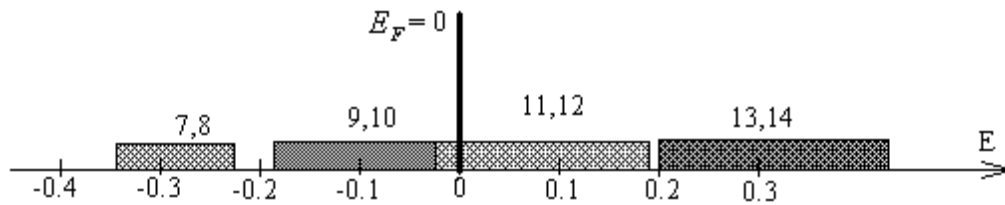


Рис. 2.18: Магнитные подзоны в области открытых орбит, соответствующих области 1 на рис.2.15, показаны с указанием их номеров в увеличенном масштабе при $p/q = 21/40 = 1/2 + 1/40$.

В квантовой задаче структура магнитных подзон в области открытых и закрытых орбит является существенно различной. Это хорошо видно из рис. 2.15 : закрытым орбитам соответствуют экспоненциально узкие энергетические зоны (уровни Ландау в квазиклассическом приближении), расстояния между которыми определяются циклотронной частотой, а открытым орбитам – относительно широкие зоны, разделённые узкими запрещёнными интервалами. Нами установлено, что на границе энергий открытых и закрытых орбит ширина магнитной подзоны резко возрастает, а расстояние между подзонами уменьшается. Такое поведение можно объяснить следующим образом: открытым орбитам соответствуют волновые функции, сильно делокализованные в области одной магнитной ячейки, в то время как закрытым орбитам отвечают локализованные функции (рис. 2.16, 2.17). Очевидно, что ширина магнитной подзоны определяется вероятностью туннелирования (интегралом перекрытия) между соседними ячейками. Поэтому для делокализованных состояний ширина магнитной подзоны больше, чем для локализованных. Структура магнитных подзон в области уровня Ферми изображена на рис.2.18. Уровень Ферми лежит в области 11-й и 12-й зоны, которые касаются зон 9 и 10. Отметим, что магнитные подзоны расположены парами, что обусловлено описанным выше двукратным вырождением решений системы (2.36) при чётном q .

2.2.3 Полная энергия электронов и магнитная восприимчивость

Найденные выше законы дисперсии и поверхности Ферми для ГЦК решётки, помещённой в сверхсильное магнитное поле, позволяют рассчитать полную энергию электронов проводимости и качественно предсказать характер осцилляций магнитной восприимчивости электронного газа. Отметим две характерные особенности осцилляционных эффектов в сверхсильных магнитных полях.

Во-первых, при изменении магнитного поля в интервале p/q от 0 до 1 должно наблюдаться несколько серий характерных осцилляций магнитной восприимчивости. Эти серии располагаются вблизи простых рациональных p/q с малыми значениями q . В частности, вблизи $p/q = 1/3$ осцилляции будут связаны с прохождением узких магнитных подзон (см. рис. 2.10) через уровень Ферми, причём период осцилляций будет определяться площадью экстремального сечения $k_z = 0$ поверхности типа (2) на рис. 2.9. Как уже отмечалось выше, для значения магнитного поля, соответствующего $p/q = 1/2$, поверхность Ферми состоит из малых электронной и дырочной полостей, показанных на рис. 2.8. Экстремальными являются сечения $k_z = \pm\pi/a$, площадь которых значительно меньше, чем, например, площадь "пуза" (сечение поверхности Ферми одновалентного металла плоскостью, проходящей через начало координат). Поскольку расстояние между двумя полостями поверхности Ферми мало, то можно ожидать значительного влияния магнитного пробоя на форму и частоту осцилляций. Подобная ситуация в квази-2D органических проводниках обсуждалась в работах [28, 29].

Во-вторых, в каждой серии осцилляций будет иметь место эффект уширения уровней, что приведёт к ослаблению амплитуды осцилляций и относительному уменьшению вклада высоких гармоник. Для количественного расчёта этого эффекта воспользуемся тем обстоятельством, что в магнитном поле $p/q = 1/q'$, где $q' \gg 1$, ширина магнитной подзоны $\Delta E_n \ll \hbar\omega_c$. Здесь $\omega_c = eH/mc$, а $m = \frac{1}{2\pi} \frac{\partial S}{\partial \varepsilon}$, где $S(\varepsilon, k_z)$ – площадь, ограниченная квазиклассической траекторией в сечении $k_z = const$. Воспользуемся простой моделью спектра в n -й трёхмерной магнитной подзоне: $\varepsilon_n(k_x, k_y, k_z) = \varepsilon_{\perp n}(k_x, k_y) + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$, где $\varepsilon_{\perp n}(k_x, k_y)$ – энергетический спектр в n -й двумерной магнитной подзоне, и предположим, что $T = 0$. Будем считать, что центр магнитной подзоны $\varepsilon_{\perp n}(k_x, k_y)$ в области указанных полей совпадает с положением n -го уровня Ландау $\hbar\omega_c(n + 1/2)$. При изменении магнитного поля число магнитных подзон может изменяться быстро, но все они группируются вблизи уровней Ландау. При этом можно пренебречь тонкой структурой этих подзон и говорить об уширении n -го уровня, которое остаётся приблизительно постоянным и равным ΔE_n . Такая картина спектра в слабых полях является типичной для любых моделей спектра 2D блоховских электронов в слабом магнитном поле.

Как известно [69], магнитный момент системы электронов с эквидистантными уровнями Ландау в слое толщиной δk_z вблизи некоторого k_z равен

$$\delta M = -\frac{\varepsilon'_F}{H}(n - n_0), \quad (2.38)$$

где $\varepsilon'_F = \varepsilon_F - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}$, а $(n - n_0)$ представляет собой разность населённости слоя δk_z в данном поле H и в нулевом поле. В отсутствие уширения уровней Ландау δM является периодической функцией $1/H$ с перио-

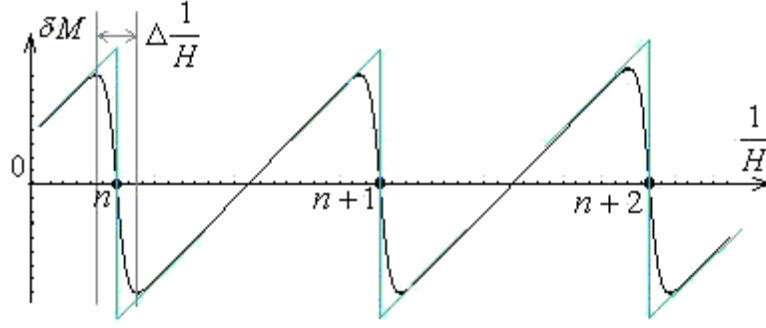


Рис. 2.19: Осцилляции намагниченности в слое δk_z без учёта (пилообразная кривая) и при учёте (непрерывная кривая) конечной ширины магнитных подзон.

дом $e\hbar/mc\varepsilon'_F$, зависящим от k_z . При значениях H , определяемых условием $\hbar\omega_c(n + 1/2) = \varepsilon'_F$, когда высший уровень Ландау проходит через ε'_F , концентрация электронов в слое δk_z меняется скачком на величину $\frac{eH}{4\pi^2 c\hbar}\delta k_z$, а намагниченность δM терпит разрыв со скачком $\frac{e\varepsilon'_F}{4\pi^2 c\hbar}\delta k_z$ (пилообразная кривая на рис.2.19).

В том случае, когда система дискретных уровней Ландау переходит в систему узких магнитных подзон, характер зависимости δM от $1/H$ изменяется. Это связано с тем, что с ростом поля очередная магнитная подзона освобождается от электронов не мгновенно, а на интервале ΔH , где $\frac{\Delta H}{H} = \frac{\Delta E_n}{\hbar\omega_c}$, в котором данная подзона проходит через ε'_F . При этом ход кривой $\delta M(1/H)$ определяется плотностью состояний в подзонах, сгруппированных вблизи уровня Ландау. Качественный ход намагниченности в этом случае показан на рис. 2.19. Область перехода соответствует прохождению через ε'_F подзоны с номером $n, n + 1, n + 2, \dots$. Очевидно, непрерывность функции $\delta M(1/H)$ приводит к качественному изменению характера фурье-спектра осцилляций, а именно, к подавлению высших гармоник. В эксперименте должны наблюдаться осцилляции с периодами, определяемыми условием $\frac{\partial \varepsilon_n}{\partial k_z} = 0$,

что в рассматриваемой модели соответствует значению $k_z=0$.

В заключении настоящего раздела вычислим полную энергию электронного газа, что позволит нам определить постоянную составляющую магнитного момента. Расчёт проведём при нуле температур, поскольку в сильном магнитном поле $kT \ll \hbar\omega_c$. Мы рассмотрим случай, когда поле $\mathbf{H} \parallel (0, 0, 1)$ и пренебрежём вторым слагаемым в (2.29), которое даёт малые поправки к полной энергии электронного газа. Значения полной энергии в безразмерных единицах представлены в таблице.

Таблица

p/q	0	1/4	1/3	1/2	2/3	3/4	1
E	-163	-170	-173	-200	-173	-170	-163

Из таблицы следует, что в магнитных полях p/q и $1 - p/q$ полная энергия электронов одинакова, причём на интервале p/q от 0 до 1/2 происходит уменьшение энергии с ростом поля. Факт уменьшения полной энергии в сильном поле связан с сильной перестройкой спектра (ср. (2.29) и (2.30)). При $p/q = 1/2$, когда $E_F \approx 0$, максимум плотности состояний находится при $\varepsilon < 0$, при этом $E_F \approx 0$, в то время как в нулевом поле плотность состояний для закона дисперсии (2.29) максимальна при $\varepsilon > 0$, а $E_F \approx 1$. Это и приводит к уменьшению полной энергии на интервале p/q от 0 до 1/2. Минимум достигается при $p/q = 1/2$, т.е. когда число квантов магнитного потока, пронизывающего элементарную ячейку, равно степени заполнения ν электронами объёма зоны Бриллюэна. Так как при $p/q = \nu = 1/2$ плотность состояний на уровне Ферми мала и плавно изменяется с энергией, можно

ожидать, что вблизи минимума кривая $E(H)$ ведёт себя плавно. Этим трёхмерная задача отличается от двумерной [58], где в области минимума производная dE/dH терпит разрыв. Подобный результат был получен в работах [32, 33], где рассматривалась задача о 3D блоховском электро́не в простой кубической решётке, помещённой в магнитное поле с различной ориентацией. Отметим, что в задаче о 2D блоховском электро́не в магнитном поле локальный минимум энергии также имеет место при условии $\nu = p/q$ [58], когда на каждый электрон приходится один квант магнитного потока. В 3D задаче подобная интерпретация невозможна. Понижение полной энергии и, в частности, наличие минимума в сильном магнитном поле в 3D кристалле свидетельствует о том, что одновалентные диамагнитные в слабых полях металлы с ГЦК решёткой (Cu, Ag, Au) в сверхсильном поле становятся парамагнитными. Действительно, при абсолютном нуле температуры постоянная часть магнитного момента на интервале p/q от 0 до $1/2$ положительна:

$$M = -\frac{\Delta E}{\Delta H} > 0, \quad (2.39)$$

т.е. электронный газ является парамагнитным. Абсолютное значение восприимчивости, определяемой как $\kappa = M/H$, по модулю сравнимо с таковым для случая слабого магнитного поля: $\kappa \approx 10^{-6} - 10^{-5}$. Заметим, что учёт спина вблизи $p/q = 1/2$ в рассматриваемой модели несуществен, поскольку плотность состояний в окрестности уровня Ферми и, следовательно, парамагнетизм Паули минимальны.

Глава 3

Квантовые состояния и магнитооптика 2D дырок

3.1 Магнитные блоховские функции и спектр 2D дырок

Задача о квантовых состояниях дырок в гетеропереходе p -типа, помещенном в магнитное поле и периодическое поле поверхностной сверхрешетки, описывается уравнением Шредингера с векторным потенциалом (1.14) и 2D периодическим потенциалом латеральной сверхрешетки, который, как уже обсуждалось в первой главе, можно выбрать в виде (1.29) [37, 38]. Гамильтониан, определяющий магнитные блоховские состояния дырок, является суммой (1.38) и (1.29):

$$H = H_{eff} + V(x, y) \cdot \hat{E}. \quad (3.1)$$

Собственные вектора оператора (3.1) являются четырёхкомпонентными векторами, записанными в $|J; m_J\rangle$ базисе (1.37):

$$\Psi_{k_x k_y}^{envelope}(\mathbf{r}) = \left(\psi_{k_x k_y}^{(1)}(\mathbf{r}), \psi_{k_x k_y}^{(2)}(\mathbf{r}), \psi_{k_x k_y}^{(3)}(\mathbf{r}), \psi_{k_x k_y}^{(4)}(\mathbf{r}) \right), \quad (3.2)$$

что определяет квантовое состояние дырок как

$$\begin{aligned} \Psi_{k_x, k_y}(\mathbf{r}) = & \psi_{k_x k_y}^{(1)}(\mathbf{r}) \left| \frac{3}{2}; \frac{3}{2} \right\rangle + \psi_{k_x k_y}^{(2)}(\mathbf{r}) \left| \frac{3}{2}; -\frac{1}{2} \right\rangle + \\ & \psi_{k_x k_y}^{(3)}(\mathbf{r}) \left| \frac{3}{2}; \frac{1}{2} \right\rangle + \psi_{k_x k_y}^{(4)}(\mathbf{r}) \left| \frac{3}{2}; -\frac{3}{2} \right\rangle. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Основное утверждение здесь заключается в следующем: как только вводится периодический потенциал (1.29), каждая из дырочных огибающих функций в выражении (3.2) становится магнитной блоховской функцией, классифицируемой квантовыми числами k_x и k_y , которые изменяются в пределах магнитной зоны Бриллюэна (1.17). Следует отметить, что трансляционные свойства каждой из компонент огибающей функции (3.2) в плоскости (xy) такие же, как и для однокомпонентных электронных состояний. В частности, каждая компонента (3.2) удовлетворяет условию Пайерлса (1.18). Отсюда следует, что при выполнении условия

$$\frac{BS}{\Phi_0} = \frac{BS}{2\pi\hbar c/|e|} = \frac{p}{q}. \quad (3.4)$$

является возможным записать каждую компоненту (3.2) $\psi_{k_x k_y}^j$ как суперпозицию квантовых состояний Ландау [14], именно,

$$\begin{aligned} \psi_{k_x k_y}^j(\mathbf{r}) = & \frac{1}{La\sqrt{q}} \sum_{\nu} C^{\nu}(z) \sum_N \sum_{n=1}^p d_{j\nu N n} \sum_{l=-L/2}^{L/2} u_{Nj} \left(\frac{x - x_0 - lqa - nqa/p}{\ell_H} \right) \times \\ & \times \exp \left(ik_x \left[lqa + \frac{nqa}{p} \right] \right) \exp \left(2\pi i y \frac{lp + n}{a} \right) \exp(ik_y y), \end{aligned} \quad (3.5)$$

Изучим подробнее структуру дырочных функций (3.5). При их построении в данной главе мы будем учитывать первые три подзоны размерного квантования, что соответствует двум подзонам тяжёлых дырок и одной подзоне лёгких дырок. Нашим базисом для дырочных состояний (3.5) будут являться следующие вектора типа (1.41):

$$e^{ik_y} (0, 0, 0, C_4^1(z)u_0), \quad e^{ik_y} (0, C_2^1(z)u_0, 0, C_4^1(z)u_1),$$

$$e^{ik_y} \left(C_1^1(z)u_0, C_2^1(z)u_2, C_3^1(z)u_1, C_4^1(z)u_3 \right), \quad e^{ik_y} \left(0, 0, 0, C_4^2(z)u_0 \right), \quad (3.6)$$

$$e^{ik_y} \left(0, 0, 0, C_4^2(z)u_1 \right), \quad e^{ik_y} \left(C_1^2(z)u_0, 0, 0, C_4^2(z)u_3 \right).$$

В формуле (3.6) верхний индекс $\nu = 1, 2$ обозначает первую или вторую подзоны размерного квантования, причём для второй подзоны компоненты, отвечающие лёгким дыркам, берутся с нулевыми коэффициентами. Легко видеть, что каждый вектор из (3.6) имеет форму (1.41) с некоторыми конкретными значениями ν и N . При этом необходимо отметить, что группа соседних дырочных уровней может и не классифицироваться монотонно возрастающей последовательностью индексов $N = -1, 0, 1, \dots$ в выражении (1.41), что является принципиальным различием между дырочными и электронными состояниями (последние описываются монотонно возрастающим индексом N). В присутствии периодического потенциала $V(x, y)$ и при выполнении условия (3.4) каждый уровень Ландау расщепляется на p подзон. Суммирование по n от 1 до p в выражении (3.5) отражает это расщепление, которое является общей чертой как электронных [9, 10, 12, 14], так и дырочных [37] состояний блоховского электрона в магнитном поле. Чтобы определить прежель изменения для прочих индексов в (3.5), нужно выбрать какую-либо из проекций $j = 1, 2, 3, 4$ для $|J; m_J\rangle$ базиса, а затем просуммировать по j -м компонентам всех векторов совокупности (3.6) с коэффициентами $d_{j\nu Nn}(k_x, k_y)$. Полное число ненулевых компонент в совокупности базисных векторов (3.6) равно 11, что меньше общего числа всех компонент всех векторов из (3.6), которое равно $4 \times 6 = 24$. Такая ситуация есть следствие зануления тех компонент (1.41), которые имели бы отрицательные значения нижнего индекса, а также прене-

брежение второй зоной размерного квантования для лёгких дырок.

После подстановки полной дырочной волновой функции (3.3) - (3.5) в уравнение Шрёдингера с гамильтонианом (3.1) мы приходим к задаче на собственные значения с матрицей размера $11p \times 11p$ для $11p$ коэффициентов $d_{j\nu Nn}(k_x, k_y)$ в каждой из $11p$ дырочных магнитных подзон $\varepsilon_{\nu Nn}(k_x, k_y)$:

$$\sum_{j'\nu'N'n'} \left(H_{j\nu Nn}^{j'\nu'N'n'} + V_{j\nu Nn}^{j'\nu'N'n'}(p/q, k_x, k_y) \right) d_{j'\nu'N'n'} = \varepsilon d_{j\nu Nn}. \quad (3.7)$$

Здесь вводится обозначение $H_{j\nu Nn}^{j'\nu'N'n'}$ для проекции гамильтониана (1.38) на базис (3.6), а $V_{j\nu Nn}^{j'\nu'N'n'}(p/q, k_x, k_y)$ соответствует матричным элементам периодического потенциала (1.29) в этом базисе. Мы проводили диагонализацию системы (3.7) для различных величин магнитного поля и амплитуд периодического потенциала. Максимальный размер матрицы (3.7), отвечающий $p/q = 20$, равнялся 220×220 . Далее мы обсудим энергетические спектры и волновые функции дырок, полученные с помощью этой диагонализации.

Выше было отмечено, что дырочные уровни Ландау могут быть классифицированы в группы, отвечающие собственным значениям гамильтониана (3.1) с общим индексом $N = -1, 0, 1, \dots$. Например, для $N = 0$ такая группа, принадлежащая первым подзонам размерного квантования с $\nu = 1$, состоит из одного уровня тяжёлых и одного уровня лёгких дырок. Им отвечает гамильтониан 2×2 с собственными векторами, компоненты которых соответствуют ненулевым позициям у второго вектора из набора (3.6), и уровни Ландау, отмеченны индексами $N = 0 - (+)$ на рис.1.6. Когда водится периодический потенциал свёрхрешётки (1.29), гамильтониан 2×2 при выполнении условия (3.4)

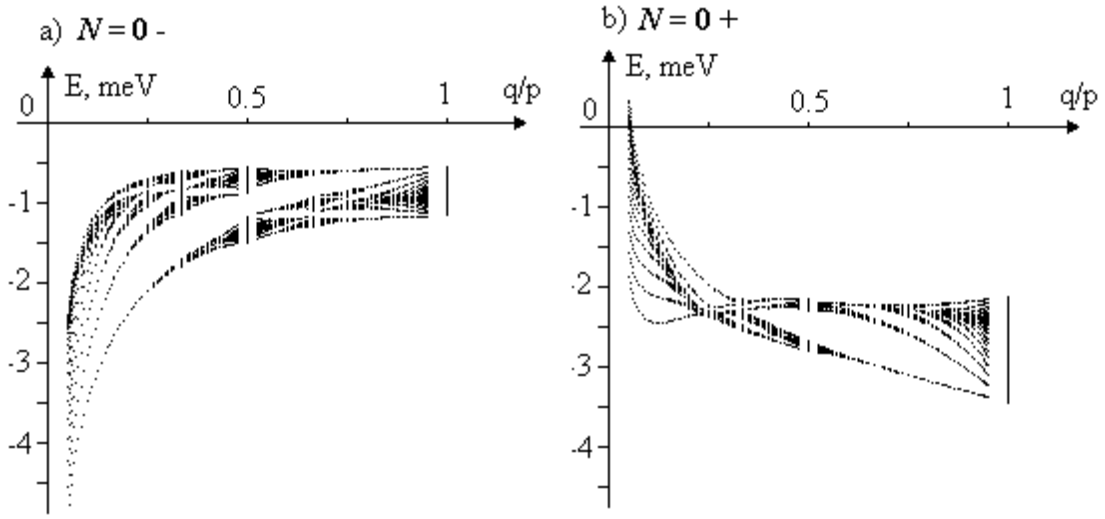


Рис. 3.1: Энергетический спектр двумерного дырочного газа, модулированного потенциалом сверхрешётки квантовых точек с периодом $a = 80nm$, изображённый как функция обратного магнитного потока q/p . Показаны магнитные подзоны, отщепившиеся от двух дырочных уровней $N = 0 - (+)$, взаимодействующих также через внедиагональные элементы гамильтониана Латтинжера. Амплитуда периодического потенциала $V_0 = -3meV$.

порождает $2p \times 2p$ задачу о собственных значениях (3.7), чей спектр состоит из $2p$ магнитных подзон, отщепившихся от уровней Ландау $N = 0 - (+)$. Если амплитуда периодического потенциала $|V_0|$ меньше расстояния между уровнями, соседними с уровнями $N = 0 - (+)$, можно исследовать их расщепление независимо. Система $2p$ магнитных подзон, на которые расщепились уровни $N = 0 - (+)$ под действием периодического потенциала с амплитудой $V_0 = -3meV$, показана на рис. 3.1 как функция обратного магнитного потока q/p . Такой аргумент на оси абсцисс является наиболее употребительным при изображении спектров типа "бабочки" Хофштадтера в приближении слабой связи. Сравнивая рис. 3.1 и обычную "бабочку" Хофштадтера для электронов, можно видеть, что в слабом магнитном поле $q/p \approx 1$ система

дырочных подзон похожа на электронную, в частности, наблюдается та же группировка подзон. Напротив, в сильных полях при $q/p \ll 1$ на рис. 3.1 можно видеть смещения в положении подзон вверх и вниз относительно центра "бабочки" при $q/p \approx 1$. Наблюдаемое различие между электронными и дырочными спектрами вызвано наличием внедиагональных членов в гамильтониане Латтинжера (1.36), влияние которых становится более существенным в сильных полях.

Далее в настоящей главе мы будем изучать спектры при большом фиксированном значении магнитного поля, отвечающем $p/q = 20$, что даёт величину $B \approx 12$ Т. Спектр системы (3.7) для такого магнитного потока, построенный при $k_x = k_y = 0$, показан в нижней части рис. 3.2. На нём изображена система неперекрывающихся магнитных подзон, на которые расщепились два наивысших (по отношению к потолку валентной зоны) уровня со значениями индекса N в выражении (1.41) $N = 2+$ and $N = -1-$. Как это принято при описании дырочных состояний [71, 23], знак $+$ ($-$) обозначает проекцию спина в доминирующей компоненте вектора (1.41). Из рис. 3.2 видно, что каждый дырочный уровень Ландау расщепился на p узких подзон, группирующихся в окрестности невозмущённого уровня, отмеченного черным кружком. Такая картина является общей как для многокомпонентных дырочных, так и для однокомпонентных электронных состояний. Обратим также внимание на то, что уровни $N = 2+$ и $N = -1-$ на рис. 3.2 расположены в ином порядке по возрастанию энергии, чем на рис. 1.6, что является следствием пересечения уровней, произошедшем при некотором промежуточном значении магнитного поля. Такие пересечения являются характерной чертой дырочных спектров [71, 23]. Из рис. 3.2 следует, что для наблюдения системы неперекрывающихся магнитных подзон, на которые расщепляются уровни с $N = 2+$ и $N = -1-$ в сильных магнитных полях, необходимо выполнение условия $|V_0| \leq \Delta E_{12}$, где ΔE_{12} есть расстояние между

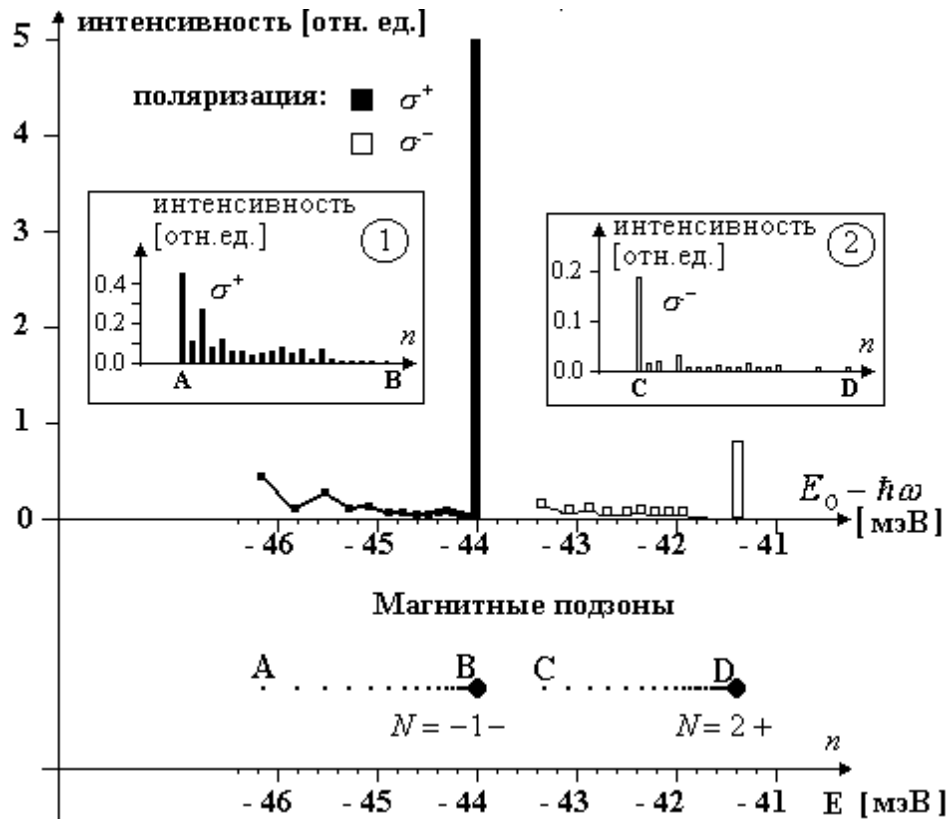


Рис. 3.2: (Внизу) система неперекрывающихся магнитных подзон, на которые расщепляются верхние дырочные уровни Ландау с $N = 2+$ и $N = -1-$, положения которых отмечено чёрными кружками. Магнитное поле отвечает $p/q = 20$, амплитуда потенциала сверхрешётки квантовых точек $V_0 = -2.5meV$. (Вверху) интенсивности люминесценции с поляризацией σ^+ (чёрный цвет) и σ^- (белый цвет) для переходов между донорными уровнями и дырочными подзонами, построенные как функция энергии фотона $\hbar\omega$. Для сравнения столбиками показаны интенсивности переходов на нерасщеплённые ($V_0 = 0$) дырочные уровни. Вставки 1 и 2 показывают тонкую структуру интенсивностей переходов в зависимости от номера дырочной подзоны. Энергия доноров E_0 отсчитывается от края валентной зоны GaAs, отвечающем точке Γ_8 .

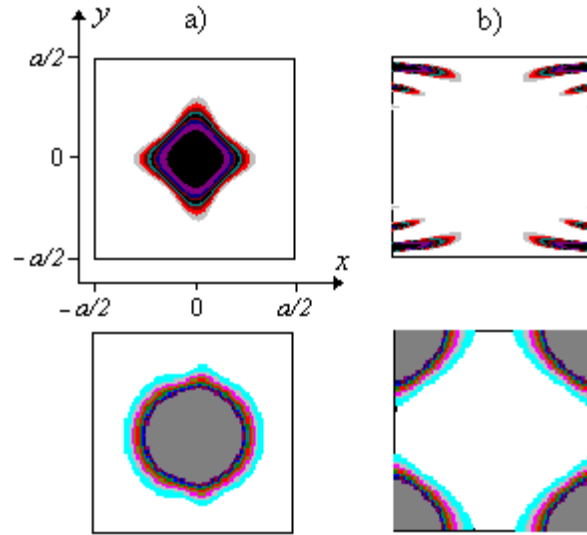


Рис. 3.3: Распределение дырочных волновых функций: $Re\psi_j > 0$ (вверху) и плотность вероятности (внизу) для компоненты с $m_J = -3/2$, построенные в одной ячейке сверхрешётки при $k_x = k_y = 0$ в подзонах A (рис. 3.3a) и B (рис. 3.3b), отмеченных на рис. 3.2.

нерасщеплёнными уровнями Ландау.

В следующем параграфе мы займёмся расчётом матричных элементов для переходов между состояниями валентной зоны и донорами, находящимися внутри гетероперехода. Поэтому нам необходимо знать пространственное распределение дырочных волновых функций (3.5) внутри одной ячейки сверхрешётки. На рис. 3.3 мы приводим распределение как $Re\psi_j > 0$ (вверху), так и $|\psi_j|^2$ (внизу) для компоненты с $m_J = -3/2$ при $k_x = k_y = 0$, которая является доминирующей в подзонах A и B , отмеченных на рис. 3.2. Необходимо отметить, что во всём интервале энергий, отвечающем подзонам между A и B (включая их самих), все прочие $|J; m_J\rangle$ компоненты функции (3.3) являются пренебрежимо малыми, коль скоро нет перекрытия с другими подзонами. Такая особенность является следствием структуры собственного векто-

ра $F_{-1} = (0, 0, 0, C_4(z)u_0)$, отвечающего уровню Ландау с $N = -1$ -, который и расщепился на подзоны от A до B на рис. 3.2. Вклад других компонент может быть обусловлен лишь внешним периодическим потенциалом $V(x, y)$, приводящим к взаимодействию между уровнями Ландау. Такое взаимодействие, однако, пренебрежимо мало для неперекрывающихся подзон на рис. 3.2, поэтому мы не строим других компонент волновой функции на рис. 3.3.

Как и для однокомпонентных электронных состояний, рассмотренных во Введении, распределения $Re\psi_j$ (и, аналогично, $Im\psi_j$) имеют различную структуру в зависимости от номера магнитной подзоны n . Именно, реальная часть волновой функции в подзоне A , расположенной далеко от точки сгущения (функция изображена на рис. 3.3а), испытывает гораздо меньше осцилляций, чем соответствующая функция (рис. 3.3б) для подзоны B , находящейся вблизи точки сгущения спектра. Мы не приводим распределений для мнимой части волновых функций, поскольку они демонстрируют сходное поведение. При этом необходимо отметить, что различный характер волновых функций в верхней части рис. 3.3 не влияет на картину профиля для плотности вероятности, показанную в нижней части рис. 3.3, которая всегда является гладкой функцией, обладающей симметрией той (в нашем случае квадратной) решётки, которая и создаёт периодический потенциал. Указанная гладкость есть следствие пространственного сдвига между максимумами $Re\psi_j$ и $Im\psi_j$, приводящими к исчезновению осцилляций для $|\psi_j|^2$ по типу формулы $\sin^2 x + \cos^2 x = 1$. Из рис. 3.3 также можно сделать вывод, что плотность вероятности (внизу) всег-

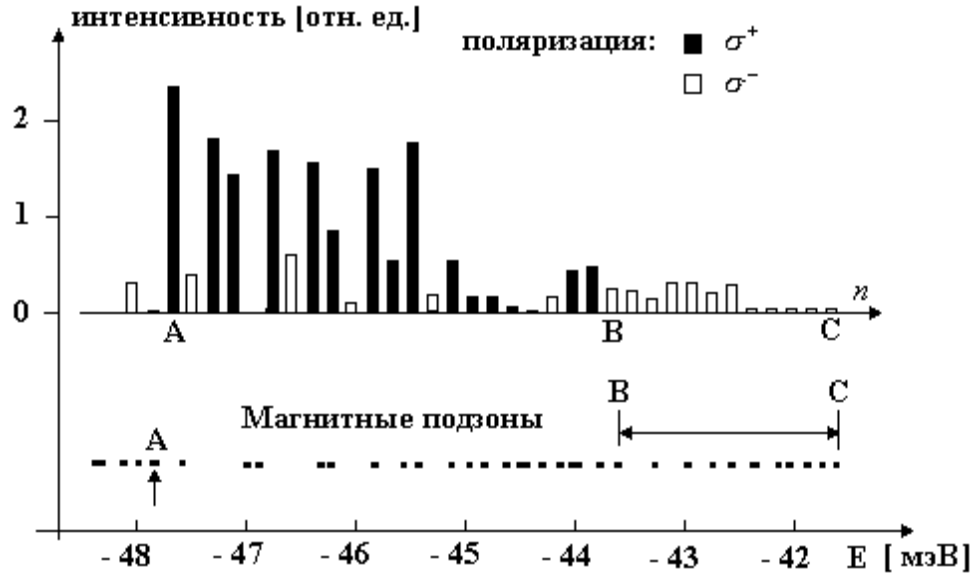


Рис. 3.4: (Внизу) система перекрывающихся магнитных подзон, относящихся к тем же уровням Ландау, что и на рис. 3.2, но расщеплённых периодическим потенциалом с большей амплитудой $V_0 = -10meV$. (Вверху) интенсивности люминесценции с поляризацией σ^+ (чёрный цвет) и σ^- (белый цвет) для переходов между монослоем доноров и магнитными подзонами дырок, построенные как функция номера подзоны n .

да имеет симметрию решётки C_4 , в то время как $Re\psi_j$ (вверху) может иметь более низкую симметрию вследствие несимметричного характера калибровки Ландау (1.14). В заключение данного абзаца можно сказать, что обсуждаемые различия в структуре волновых функций в разных магнитных подзонах окажут своё влияние на величину интенсивности оптических переходов, связанных с конкретной подзоной, что будет подтверждено в следующем пункте. Когда амплитуда периодического потенциала V_0 возрастает и условие $|V_0| < \Delta E_{12}$ перестаёт выполняться, структура дырочного спектра выглядит по-иному. Так, в нижней части рис. 3.4 показаны магнитные подзоны в ситуации, когда $V_0 = -10 meV$, а $\Delta E_{12} \approx 2.5 meV$. В этом случае магнитные подзо-

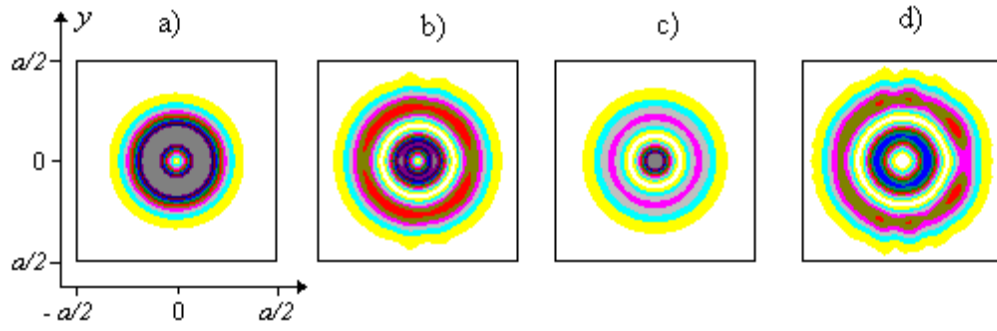


Рис. 3.5: Распределения плотности вероятности $|\psi_j|^2$ внутри одной ячейки сверхрешётки для всех четырёх дырочных компонент, построенное при $k_x = k_y = 0$ в подзоне A , отмеченной стрелкой на рис. 3.4. Рисунки (a) – (d) соответствуют компонентам $|\frac{3}{2}; \frac{3}{2}\rangle$, $|\frac{3}{2}; -\frac{1}{2}\rangle$, $|\frac{3}{2}; \frac{1}{2}\rangle$ и $|\frac{3}{2}; -\frac{3}{2}\rangle$ для дырочной функции (3.3)

ны, происходящие от различных уровней Ландау, перемешаны почти всюду, за исключением области вблизи наивысшего уровня, в данном случае отвечающего значению $N = 2+$. Последнее обстоятельство связано с одновременным уменьшением энергии всех подзон по сравнению с невозмущённым уровнем в знакопостоянном потенциале $V(x, y)$ вида (1.29). Область, где подзоны остаются не перемешанными с другими, не относящимися к уровню $N = 2+$, отмечена на рис. 3.4 и заключена между подзонами от B до C . В этом интервале не перемешанных подзон можно ожидать некоторого отличительного поведения интенсивностей оптических переходов, что и будет показано в следующем пункте.

Следует также отметить, что в условиях сильного перемешивания подзон доминирование какой-либо одной компоненты $|J; m_J\rangle$ базиса становится менее выраженным. Такое поведение волновых функций проиллюстрировано на рис. 3.5, где изображены распределения плотности вероятности $|\psi_j|^2$ для всех четырёх компонент функции (3.3) в магнитной подзоне A , отмеченной стрелкой на рис. 3.4. Хорошо видно,

что все компоненты имеют одинаковый порядок, что является следствием перемешивания подзон, принадлежащих уровням Ландау с различными доминирующими компонентами собственных векторов. Отметим при этом, что, независимо от амплитуды периодического потенциала, распределение плотности вероятности для всех компонент на рис. 3.5 обладает симметрией решётки, генерирующей этот потенциал.

3.2 Расчёт интенсивностей межзонных оптических переходов

Как было упомянуто во Введении, одним из возможных экспериментальных методов исследования квантовых состояний в магнитных подзонах является измерение интенсивностей магнитооптических переходов. Ниже мы проведём расчёт матричных элементов и интенсивностей переходов между электронами, связанными с атомами донорной примеси, расположенными в виде монослоя внутри гетероперехода (δ -легирование), и магнитными блоховскими состояниями валентной зоны.

Рассмотрим процесс, при котором излучается фотон, а электрон перемещается из состояния донорного атома в валентную зону. Следуя работам [23, 24], мы предполагаем, что благодаря δ -легированию донорные атомы расположены на хорошо определённом расстоянии от границы гетероперехода. Конечное квантовое состояние $\Psi_{k_x k_y}^f$ представляет собой дырочную функцию (3.3), а начальное квантовое состояние Ψ^i описывается водородоподобной функцией донорной примеси, находящейся на расстоянии $z = z_0$ от границы гетероперехода и в некоторой

точке с координатами (x_0, y_0) внутри элементарной ячейки. Такая смесь описывается огибающей функцией $\psi_D(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0)$, где $\mathbf{r}_0 = (x_0, y_0, z_0)$ и

$$\psi_D(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = A \exp\left(-\frac{1}{r_D} [(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2 + (z - z_0)^2]^{1/2}\right).$$

Здесь $r_D = \kappa_e \hbar^2 / m^* e^2$ обозначает боровский радиус донора в гетероструктуре GaAs/AlGaAs с диэлектрической постоянной κ_e и эффективной массой m^* на дне валентной зоны. Значение r_D , полученное из экспериментов по люминесценции, составляет примерно 15 nm [23]. Состояния в зоне проводимости характеризуются атомной функцией s -типа $1.42 s_\alpha(\mathbf{r})$, где значения $\alpha = 1(2)$ отвечают функциям $|s \uparrow\rangle$ ($|s \downarrow\rangle$) из $|J; m_J\rangle$ базиса. Поскольку слой доноров в целом не обладает определённой проекцией углового момента, начальное квантовое состояние можно представить как суперпозицию функций с различным знаком m_J :

$$\Psi^i = \psi_D(\mathbf{r}, \mathbf{r}_0) \cdot \frac{|s \uparrow\rangle + |s \downarrow\rangle}{\sqrt{2}}.$$

После определения начального и конечного квантовых состояний интенсивность магнитолюминесценции $I(\hbar\omega)$ представляется в виде

$$I(\hbar\omega) \propto \sum_{if} \overline{|M_{if}|^2} \delta(E_f - E_i - \hbar\omega), \quad (3.8)$$

где предполагается, что начальное состояние Ψ^i полностью занято, а конечное $\Psi_{k_x k_y}^f$ полностью свободно. Если энергия электронов, связанных с донорами, является фиксированной, суммирование по начальным состояниям в (3.8) сводится к умножению на полное число донорных атомов в рассматриваемом объёме. Далее, матричный элемент переходов между состояниями донора и дырочной магнитной подзоной записывается как [75]

$$\begin{aligned}
M_{if} &= \langle \Psi_{k_x k_y}^f | \mathbf{p} \cdot \mathbf{e} | \Psi^i \rangle = \\
&= \sum_{\alpha=1}^2 \sum_{j=1}^4 \langle v_j | \mathbf{p} \cdot \mathbf{e} | s_{\alpha} \rangle \langle \psi_{k_x k_y}^{(j)} | \psi_D \rangle + \sum_{\alpha=1}^2 \sum_{j=1}^4 \langle \psi_{k_x k_y}^{(j)} | \mathbf{p} \cdot \mathbf{e} | \psi_D \rangle \langle v_j | s_{\alpha} \rangle. \quad (3.9)
\end{aligned}$$

В формуле (3.9) через \mathbf{e} обозначен единичный вектор в направлении электрического поля излучения, а скалярные произведения определяются так:

$$\begin{aligned}
\langle v_j | (\dots) | s_{\alpha} \rangle &= \int_{cell} v_j(\mathbf{r})^* (\dots) s_{\alpha}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \\
\langle \psi_{k_x k_y}^{(j)} | (\dots) | \psi_D \rangle &= \int_{crystal} \psi_{k_x k_y}^{(j)*}(\mathbf{r}) (\dots) \psi_D(\mathbf{r}) d\mathbf{r}.
\end{aligned}$$

Первое слагаемое в (3.9) соответствует матричному элементу переходов между донорами и валентной зоной. Второе слагаемое равно нулю в силу ортогональности функций $v_j(\mathbf{r})$ и $s_{\alpha}(\mathbf{r})$, представляющих функции $|J; m_J\rangle$ базиса p - и s -типа, соответственно. Как покажут результаты расчётов, переходы в магнитные подзоны, принадлежащие различным уровням Ландау, характеризуются различными поляризациями, что является следствием правил отбора (1.43).

Обсудим теперь роль огибающих функций в расчёте интенсивностей. Перекрытие между донорной и дырочной функцией, а, следовательно, и величина матричного элемента (3.9) сильно зависят от случайного положения донорного атома внутри элементарной ячейки сверхрешётки. Поскольку реальная сверхрешётка содержит много ячеек, необходимо провести усреднение выражения (3.9) по многим возможным положениям донорного атома, т.е. ввести усреднённый матричный элемент переходов

$$\overline{|M|^2} = \frac{1}{N_D} \sum_{x_0 y_0} |M(x_0 y_0)|^2, \quad (3.10)$$

где N_D обозначает полное число учитываемых положений донора. В результате расчёта по формуле (3.10) мы обнаружили, что после усреднения матричный элемент практически не зависит (с точностью до нескольких процентов) от квазиимпульса, классифицирующего магнитные блоховские функции. Такая независимость от k_x и k_y связана с тем, что радиус донорной функции существенно меньше периода сверхрешётки a . Принимая это во внимание, суммирование по конечным состояниям в (3.8) также выполняется просто. Известно (см. рис. 3.2), что магнитные подзоны при $p/q = 20$ очень узкие, причём их ширина, по-видимому, меньше столкновительного уширения. Соответствующие оценки для электронного газа могут быть найдены, например, в [11]. Поэтому можно рассматривать магнитные подзоны при $p/q = 20$ как совокупность дискретных уровней с фиксированной энергией, что позволяет перейти от суммирования по f в формуле (3.8) к умножению на полное число состояний в магнитной подзоне. Это число определяется площадью магнитной зоны Бриллюэна (1.17), одинаковой для всех подзон. В результате мы обнаруживаем, что изменение интенсивности как функции энергии фотона почти в точности повторяет поведение матричных элементов (3.10).

Результаты расчёта интенсивности магнитолюминесценции с циркулярной поляризацией σ^+ and σ^- для случая неперекрывающихся подзон показаны в верхней части рис. 3.2. Рассматриваются переходы в подзоны, на которые расщепляются при $p/q = 20$ два наивысших уровня Ландау с $N = -1-$ and $N = 2+$, причём амплитуда потенциала $V_0 = -2.5meV$ отвечает условию $|V_0| < \Delta E_{12}$ (см. спектр в ниж-

ней части рисунка). На горизонтальной оси отложена энергия фотона $\hbar\omega$, отсчитываемая от отметки E_0 , представляющей собой расстояние между донорным уровнем и энергией в точке Γ_8 валентной зоны. С целью сравнения рассчитанных интенсивностей со значениями, отвечающими переходам на нерасщеплённые уровни Ландау ($V_0 = 0$), последние изображены столбиками в правой части каждой гистограммы на рис. 3.2 над положениями уровней Ландау. Можно сделать качественную оценку, говорящую о том, что максимальная интенсивность переходов в одну из p подзон примерно в p раз меньше интенсивности для нерасщеплённого уровня Ландау. Эта оценка находится в соответствии с отношением числа состояний на уровне Ландау и в магнитной подзоне, также равным p . Из рис. 3.2 очевидно, что переходы в подзоны, отвечающие разным уровням Ландау, имеют различную поляризацию, как и для случая нерасщеплённых уровней Ландау [75, 23, 24]. Именно, для поляризации σ^+ наблюдаются переходы в подзоны, на которые расщепился уровень с $N = -1-$, в то время как излучение с поляризацией σ^- отвечает переходам в подзоны уровня $N = 2+$. На вставках 1, 2 к рис. 3.2 зависимость интенсивности перехода от номера подзоны показана в увеличенном масштабе. Можно сделать вывод, что переходы в подзоны, расположенные далеко от точки сгущения спектра (подзоны A and C), являются более интенсивными, чем в подзоны B и D , которые находятся вблизи невозмущённых уровней Ландау. Такое поведение является следствием осцилляторного характера дырочных волновых функций в подзонах типа B и D (см. рис. 3.3). Именно, пространственный масштаб функций в подзоне A (рис. 3.3а) того же

порядка, что и постоянная решётки a , которая превосходит боровский радиус донора r_D , в то время как период осцилляций волновой функции на рис. 3.3b существенно меньше r_D . В результате матричный элемент переходов в подзоны типа B быстро спадает с ростом номера n , что объясняет структуру интенсивностей на рис. 3.2. Мы полагаем, что выявленные различия в интенсивности и поляризации излучения для переходов в различные магнитные подзоны будут способствовать их экспериментальному исследованию в оптических экспериментах.

Далее мы рассмотрим случай больших амплитуд периодического потенциала V_0 , приводящих к перемешиванию магнитных подзон от разных уровней Ландау (рис. 3.4). Поведение интенсивностей как функции номера подзоны n показано в верхней части этого рисунка. Рассматривается область энергий, отвечающая тем же наивысшим уровням Ландау $N = -1-$ и $N = 2+$ при $p/q = 20$, но расщеплённым более сильным периодическим потенциалом с $V_0 = -10meV$. Поскольку расстояние между рассматриваемыми уровнями Ландау при $p/q = 20$ $\Delta E_{12} < |V_0|$, наблюдается сильное перемешивание магнитных подзон (нижняя часть рис. 3.4), отражённое в перемешивании интенсивностей переходов с противоположными поляризациями (верхняя часть рис. 3.4). В правой части рис. 3.4 существует, однако, область, где переходы отвечают одной поляризации. Эта область расположена между подзонами B и C , которые происходят от уровня $N = 2+$ и не перемешаны с подзонами от уровня $N = -1-$. Таким образом, переключение поляризации от σ^+ к σ^- в реальном эксперименте высветит эту группу подзон отдельно, что будет способствовать их детектированию.

Глава 4

Квантование холловской проводимости дырок в периодическом потенциале

4.1 Топологические свойства нулей волновой функции в координатном пространстве

В первой главе было отмечено, что магнитная блоховская функция имеет по крайней мере p нулей в магнитной ячейке, если магнитный поток сквозь элементарную ячейку равен рациональному числу p/q квантов потока. Это обстоятельство является следствием условий Пайерлса (1.18). Представляется интересным обобщить этот результат на случай многокомпонентных квантовых состояний. Именно, пусть $\theta_{\mathbf{k}}^j$ обозначает фазу периодической составляющей для j -й компоненты $u_{\mathbf{k}}^j(\mathbf{r}) = \exp(-i\mathbf{k}\mathbf{r})\psi_{\mathbf{k}}^j(\mathbf{r})$ дырочной функции $\psi_{\mathbf{k}}^j(\mathbf{r})$, определённой в (3.5). Тогда, аналогично электронной задаче [25], для каждой такой фазы

можно ввести циркуляции Γ_j , определяемые следующим образом:

$$\Gamma_j = \frac{1}{2\pi} \oint d\mathbf{l} \frac{\partial \theta_{\mathbf{k}}^j(x, y)}{\partial \mathbf{l}} \quad (4.1)$$

где контур интегрирования выбирается вдоль положительного направления обхода границы магнитной ячейки. Выше в главе 3 было отмечено, что условия Пайерлса (1.18) выполняются одинаково для каждой компоненты дырочной волновой функции. Поэтому представляется естественным, что циркуляции (4.1) оказываются равными для всех компонент:

$$\Gamma_j = -p, \quad j = 1, 2, 3, 4. \quad (4.2)$$

При этом, однако, положение каждого нуля внутри магнитной ячейки и полное число нулей могут быть различными для каждой компоненты $|J; m_J\rangle$ базиса в силу различной структуры базисных функций в (3.5) при разном j . Нужно отметить, что полное число нулей может быть больше p в силу противоположного знака у некоторых циркуляций, которые компенсируют друг друга. Все эти результаты иллюстрирует рис. 4.1, где показаны распределения плотности вероятности для всех четырёх дырочных компонент при $k_x = k_y = 0$. Значение магнитного потока $p/q = 5$, что отвечает случаю неперекрывающихся магнитных подзон. На рис. 4.1 нули волновых функций показаны схематично чёрными кружками. Некоторые нули расположены на границе или в углах магнитной ячейки и поэтому показаны в виде половинок либо четвертей кругов. Порядок нулей изображается кружками разного диаметра, что поясняется на нижней вставке к рисунку. Можно видеть, что различные компоненты имеют разное число и, вообще говоря, разный порядок нулей. При этом, однако, для всех компонент циркуляции (4.1) равны и соотношение (4.2) выполняется. Такая независимость от конкретной структуры распределения плотности вероятности

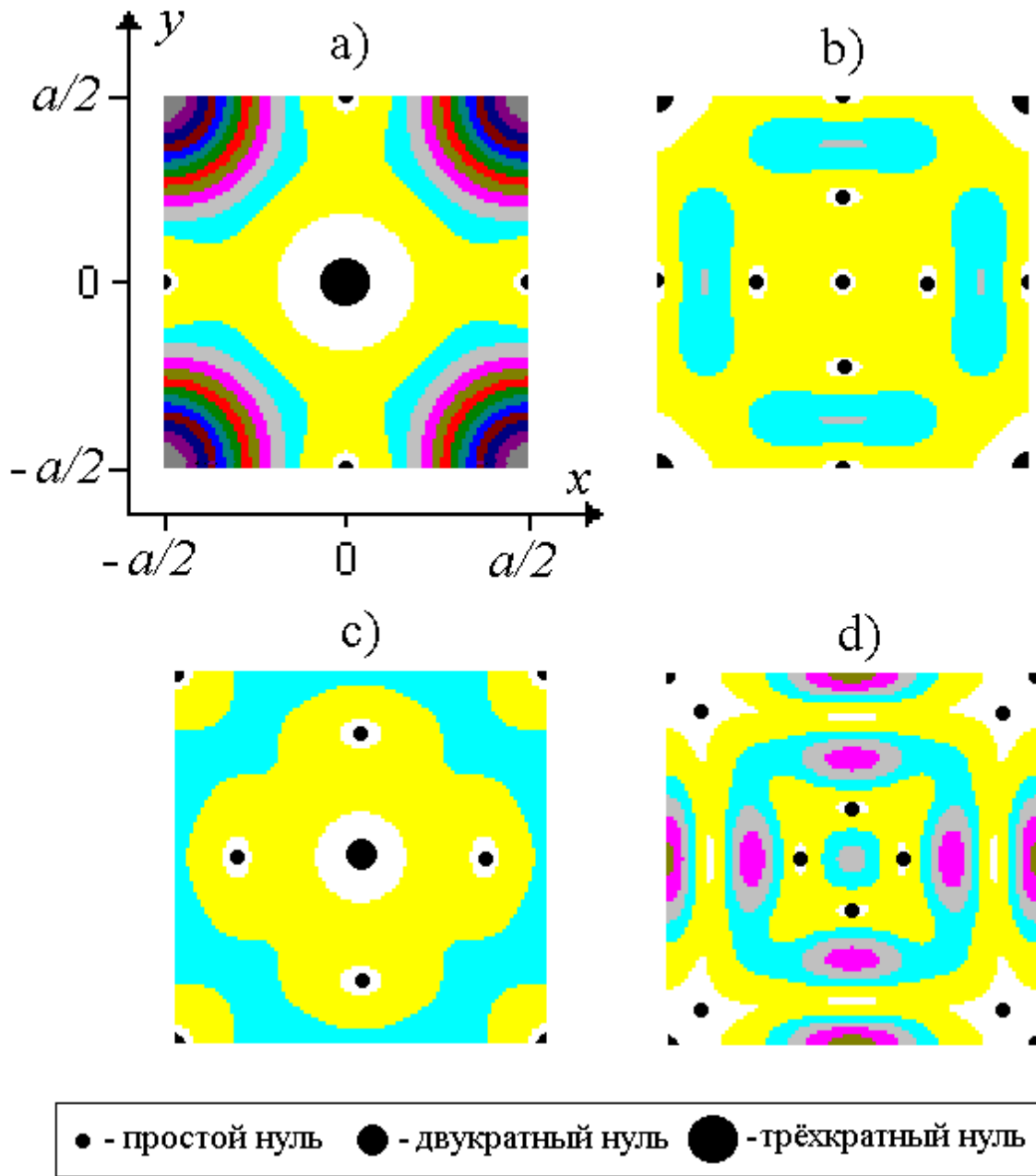


Рис. 4.1: Распределение плотностей вероятности для компонент $|J; m_J\rangle$ базиса в магнитной ячейке при $p/q = 5$ и $k_x = k_y = 0$. Рисунки (a) – (d) соответствуют компонентам $|\frac{3}{2}; \frac{3}{2}\rangle$, $|\frac{3}{2}; -\frac{1}{2}\rangle$, $|\frac{3}{2}; \frac{1}{2}\rangle$ и $|\frac{3}{2}; -\frac{3}{2}\rangle$, соответственно. Тёмные участки отвечают большим значениям плотности вероятности. Положение нулей отмечено чёрными кружками, нули на границе и в углах изображены как половины либо четверти кругов. Диаметр кругов соответствует порядку нулей (см. вставку внизу).

является отражением того, что результат, получаемый из выражения для циркуляций (4.1), имеет топологическую природу.

4.2 Расчёт холловской проводимости

Холловская проводимость σ_H квантуется в единицах e^2/h , если уровень Ферми расположен в запрещённой зоне. Значение σ_H определяется суммой проводимостей от всех заполненных подзон, расположенных под уровнем Ферми. Поэтому предварительно необходимо рассмотреть холловскую проводимость одной полностью заполненной подзоны α . В отсутствие разупорядочения и при нулевой температуре вклад подзоны α в холловскую проводимость даётся следующей формулой: [9, 11, 25, 26]

$$\sigma_H^\alpha = \frac{e^2}{\pi^2 \hbar} \int \text{Im} \left\langle \frac{\partial u_{\mathbf{k}}}{\partial k_y} \middle| \frac{\partial u_{\mathbf{k}}}{\partial k_x} \right\rangle d^2 k \quad (4.3)$$

где $u_{\mathbf{k}} = \Psi_{k_x k_y}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ есть периодическая часть полной дырочной функции (3.3) в данной подзоне. Для четырёхкомпонентной функции (3.3) выражение (4.3) можно преобразовать в сумму четырёх слагаемых:

$$\sigma_H^\alpha = \frac{e^2}{\pi^2 \hbar} \sum_{j=1}^4 \int \text{Im} \left\langle \frac{\partial u_{\mathbf{k}}^j}{\partial k_y} \middle| \frac{\partial u_{\mathbf{k}}^j}{\partial k_x} \right\rangle d^2 k \quad (4.4)$$

где $u_{\mathbf{k}}^j = \Psi_{k_x k_y}^{(j)}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\mathbf{r}}$ и $\Psi_{k_x k_y}^{(j)}(\mathbf{r})$ определяются в (3.5). В нашей работе мы ограничиваемся рассмотрением магнитных подзон, относящихся к нижней зоне размерного квантования, которая одна является заполненной при типичных концентрациях носителей. Поэтому в настоящей главе мы не будем учитывать вторую зону размерного квантования тяжёлых дырок, исключив три последних базисных вектора из набора (3.6). Это уменьшит число ненулевых базисных компонент с 11 до

7. Далее выполняется подстановка дырочной функции $u_{\mathbf{k}}^j$ в выражение (4.3). Принимая во внимание ортогональность и нормировку базисных функций в (3.5), можно выразить (4.4) через частные производные компонент собственного вектора $d_{j\nu Nn}(k_x, k_y)$, описывающего квантовое состояние в периодическом потенциале. Эта часть расчёта выполняется совершенно аналогично электронной задаче с однокомпонентной функцией [26, 11]. Для краткости мы заменим совокупность индексов $(j\nu Nn)$ у вектора $d_{j\nu Nn}(k_x, k_y)$ на один индекс $n = 1, \dots, 7p$, который последовательно пробегает все необходимые значения. В результате из (4.4) будет получено следующее выражение для σ_H :

$$\sigma_H = \frac{e^2}{\pi^2 \hbar} \int \text{Im} \left[\frac{i}{2} \ell_H^2 + \sum_{n=1}^{7p} \frac{\partial d_n^*}{\partial k_y} \frac{\partial d_n}{\partial k_x} \right] d^2 k \quad (4.5)$$

Выражение (4.5) было изначально получено Усовым [26] для случая магнитной подзоны, отщепившейся от одиночного уровня Ландау. Мы полагаем, что (4.5) может быть использовано и в ситуации, когда спектр состоит из нескольких взаимодействующих электронных или дырочных уровней, если только подзоны не касаются друг друга при каком-то \mathbf{k} , т.е. в отсутствие вырождения. Отличие от одноуровневой задачи лишь в размере соответствующего матричного уравнения, который равен $N \cdot p$ вместо p . Ортогональность и нормировка базисных функций, использованных при построении дырочной функции (3.5) обладает теми же свойствами, что и в одноуровневой задаче. Это позволяет нам непосредственно применить подход, предложенный Усовым, к задаче со многими взаимодействующими уровнями Ландау 2D дырок. Последние, как это уже отмечалось выше, связаны через недиагональные эле-

менты гамильтониана Латтинжера даже при нулевом периодическом потенциале.

Из выражения (4.5) видно, что расчёту холловской проводимости должно предшествовать изучение аналитических свойств коэффициентов d_n как функций переменных интегрирования, т.е. компонент квазиимпульса. При этом целесообразно действовать в несколько этапов. Во-первых, двойной интеграл в (4.5) можно преобразовать в криволинейный интеграл по контуру [9, 26, 83, 11]. С целью упрощения расчёта контур интегрирования можно продолжить с границы одной МЗБ на расширенную МЗБ (1.48), обходя при этом особенности подынтегрального выражения. Такой выбор контура оставит лишь вклад от особенностей, а вклад от границ расширенной МЗБ будет равен нулю [26, 11]. Можно показать [26], что вклад от особенностей, представляющий собой сумму интегралов по окружностям пренебрежимо малого радиуса вокруг особых точек, есть не что иное, как набег фазы волновой функции, представляемой вектором с компонентами $\mathbf{d} = (d_1, \dots, d_{N_p})$. Рассмотрим кратко основную схему этого вывода. При любом \mathbf{k} можно выбрать такое представление вектора $\mathbf{d}(\mathbf{k})$, чтобы одна из его компонент, например, d_1 , была вещественна [25, 26]. В самом деле, для этого достаточно умножить $\mathbf{d}(\mathbf{k})$ на равное по модулю единице число $d_1^*/|d_1|$. Особые точки \mathbf{k}_m , $m = 1, 2, \dots$ в таком представлении определяются как точки, где $d_1(\mathbf{k}_m) = 0$. Все остальные компоненты \mathbf{d} имеют в новом представлении некоторую ненулевую фазу и могут быть записаны как $d_j = |d_j| \exp(i\theta_j)$, $j = 2, 3, \dots$. Пользуясь соотношениями линейной алгебры, можно показать [26], что при обходе особой точки \mathbf{k}_m набег фазы S_m будет одинаковым для всех компонент d_1, d_2, \dots, d_{N_p} . Поэтому для определённости мы будем рассматривать поведение компоненты d_2 . Набег фазы S_m при обходе особой точки \mathbf{k}_m определяется как полный угол поворота (в единицах 2π) вектора с компонентами $(\text{Red}_2(\mathbf{k}), \text{Im}d_2(\mathbf{k}))$. Типичная картина распределения d_1 , а также Red_2 и $\text{Im}d_2$ в двух магнитных подзонах показана на рисунках 4.2 и 4.3.

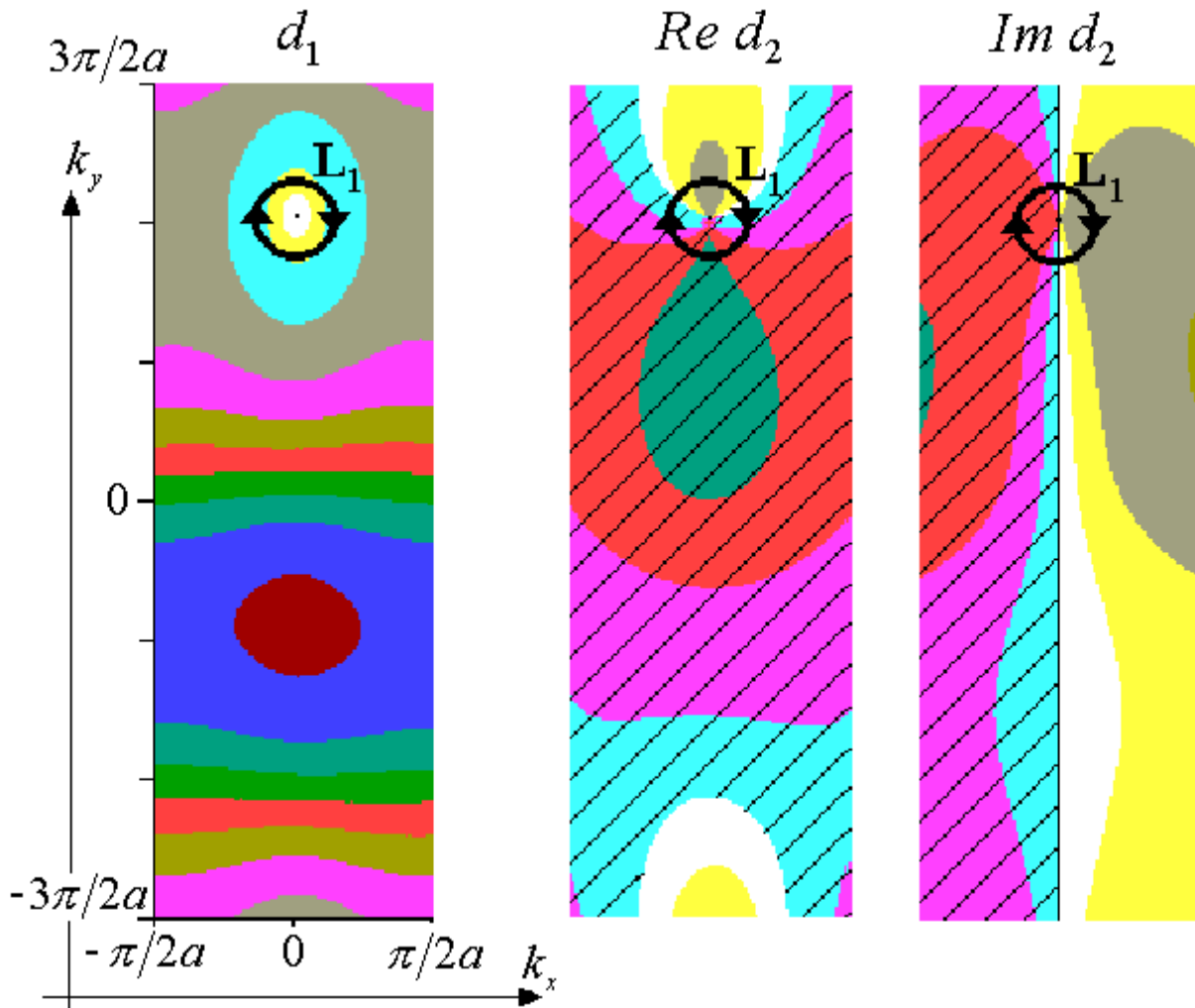


Рис. 4.2: Зависимость от квазиимпульса компоненты d_1 , а также реальной и мнимой частей компоненты d_2 собственного вектора в представлении, когда d_1 вещественно. Рассматривается подзона, дающая вклад $+1$ в холловскую проводимость. Значение магнитного потока $p/q = 3/2$, период решётки $a = 80$ nm, амплитуда периодического потенциала $V_0 = 0.7$ meV, что отвечает неперекрывающимся магнитным подзонам. Тёмные значения соответствуют большим значениям величины $d_{1,2}$, отрицательные значения заштрихованы. Показаны контур L и направление обхода особенностей.

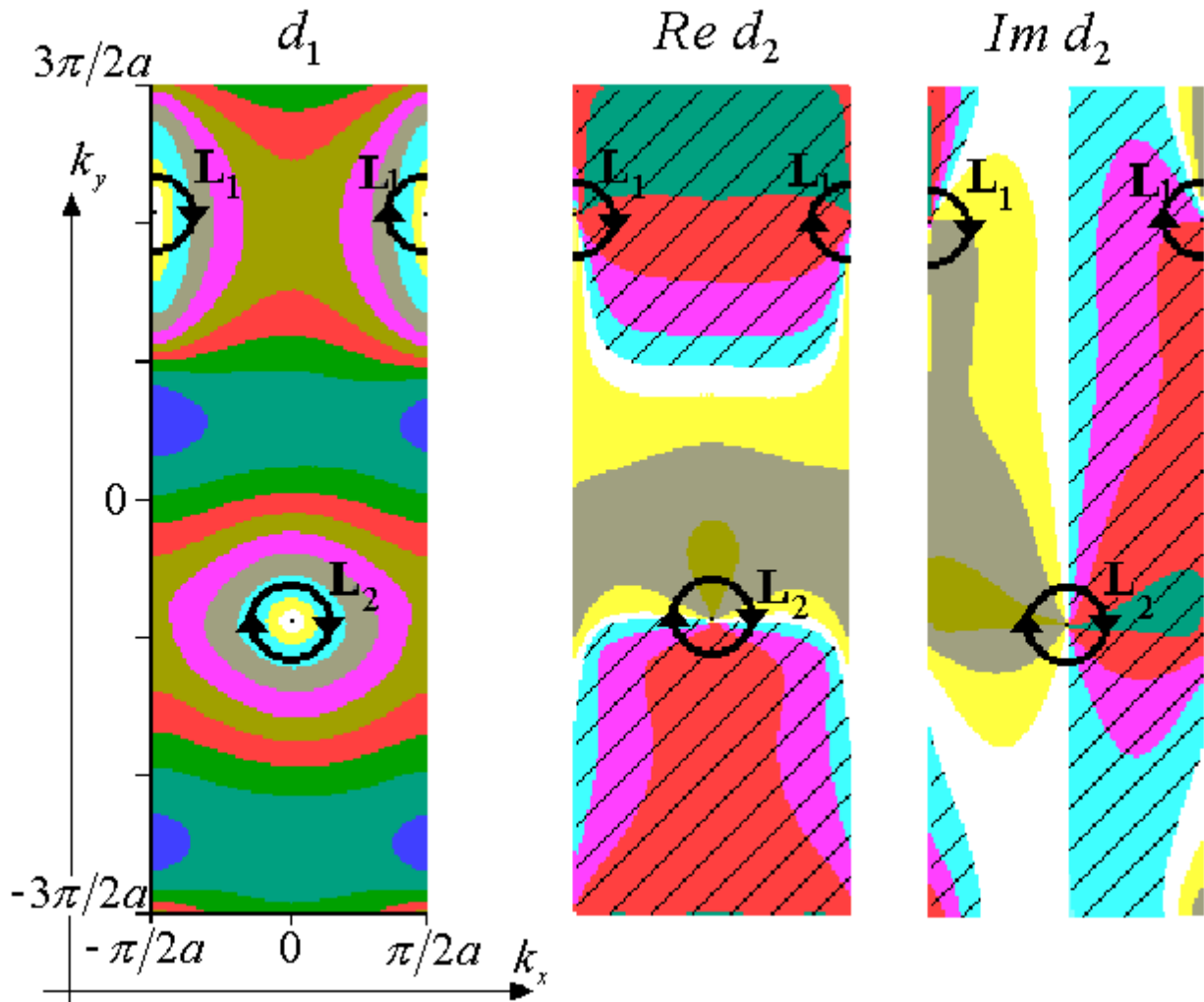


Рис. 4.3: То же, что на рис.4.2, но для подзоны с двумя особенностями в k -пространстве, что отвечает значению -1 холловской проводимости.

Значение магнитного потока на рис.4.2 и 4.3 $p/q = 3/2$, период решётки $a = 80$ nm, амплитуда периодического потенциала $V_0 = 0.7$ meV, что отвечает неперекрывающимся магнитным подзонам. Контурь обхода $L_{1,2}$ вокруг особенностей показаны схематически. Из рисунков 4.2 и 4.3 очевидно, что при подходе к особой точке $d_1 \rightarrow 0$, отмеченной чёрной точкой, как мнимая, так и реальная части d_2 имеют различные пределы в зависимости от направления похода к \mathbf{k}_m . Это означает, что как Red_2 , так и Imd_2 не имеют математического предела в точке, где $d_1 = 0$. Вклад некоторой компоненты d_j в холловскую проводимость, даваемый особой точкой \mathbf{k}_m , пропорционален $|d_j|^2 S_m^j$, где S_m^j есть набег фазы для компоненты d_j при обходе данной особой точки. Усовым было показано, что для всех компонент $j = 2, 3, \dots, Np$ набег фаз одинаковы, $S_m^j = S_m$. В силу этого суммирование по всем компонентам вектора \mathbf{d} даст следующий вклад в холловскую проводимость от особой точки \mathbf{k}_m :

$$\sum_j |d_j|^2 S_m^j = S_m \sum_j |d_j|^2 = S_m, \quad (4.6)$$

где была использована нормировка вектора $\mathbf{d} = (d_1, \dots, d_{Np})$. После определения набегов фаз во всех особых точках для данной магнитной подзоны можно применить формулу (1.49) для холловской проводимости. Рассматривая выражение (1.49), можно заметить, что первый член в квадратных скобках есть вклад, по форме напоминающий вклад от уровня Ландау свободного электрона, но делённый на p , т.е. на число подзон для одного такого уровня. Второе слагаемое в (1.49) обусловлено периодическим потенциалом, точнее, его влиянием на топологию волновой функции в расширенной магнитной зоне Бриллюэна (1.48). Для любой магнитной подзоны в такой зоне найдётся хотя бы одна

особая точка, так как иначе холловская проводимость (1.49) не будет выражаться целым числом e^2/h . Данное целое число, как это отметил Комото [25], имеет топологическую природу и представляет собой первое число Черна векторного расслоения, сопоставляемого магнитной подзоне. В нашем случае это расслоение строится, упрощённо говоря, как сопоставление каждой точке расширенной МЗБ (1.48) вектора с компонентами (Red_2, Imd_2) .

Закон квантования σ_H как функции числа заполненных магнитных подзон, т.е. как функции энергии Ферми, показан на рисунках 4.4 – 4.5, которые отвечают случаям неперекрывающимся и перекрывающимся магнитных подзон, соответственно. Когда амплитуда V_0 периодического потенциала (1.29) не превосходит расстояния ΔE_{12} между соседними уровнями Ландау, перекрытия магнитных подзон не происходит (см. рис. 4.4), и возможные отличия в квантовании σ_H от ”обычной бабочки” Хофштадтера вызваны взаимодействием между дырочными уровнями Ландау, обусловленным недиагональными элементами гамильтониана Латтинжера [37]. Квантование холловской проводимости в щелях между непрерывными магнитными подзонами показано на рис. 4.4. Необходимо заметить, что при плавном увеличении концентрации дырок, сопровождающимся движением уровня Ферми через магнитную подзону (либо через группу перекрытых подзон, см. ниже), холловская проводимость плавно изменяется между соседними квантованными значениями, отмеченными на рисунках 4.4) – 4.5) жирными линиями. Плавное же изменение σ_H , точная динамика которого нам неизвестна, отмечено пунктирной линией. При увеличении амплитуды периодического потенциала V_0 происходит перекрытие магнитных подзон, относящихся к различным уровням Ландау. Более того, может происходить и касание подзон в некоторой точке магнитной зоны Бриллюэна. Такое касание означает наличие вырождения в спектре, и применение формулы (1.49) для расчёта холловской проводимости исключается.

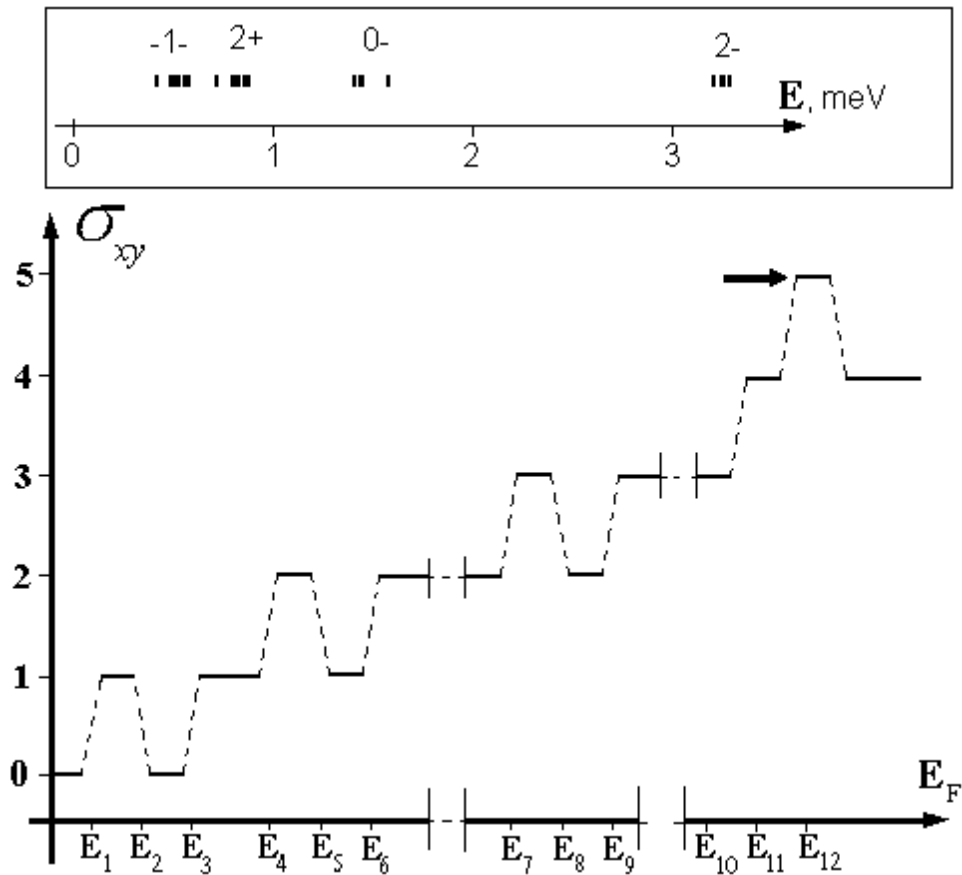


Рис. 4.4: (Вверху) система неперекрывающихся магнитных подзон, происходящих от первых четырёх дырочных уровней Ландау $N = -1, 0, 2$ с доминирующей проекцией спина \pm . Магнитный поток $p/q = 3/2$, амплитуда периодического потенциала $V_0 = 0.7$ мэВ. (Внизу) квантование σ_H как функция числа заполненных подзон (положения уровня Ферми). Энергии E_i схематически обозначают положения центров подзон, а интерполяционные штриховые линии соединяют холловские плато. Стрелкой показано отличие в значении σ_H от квантования в электронном газе с несколькими невзаимодействующими уровнями Ландау [12, 20].

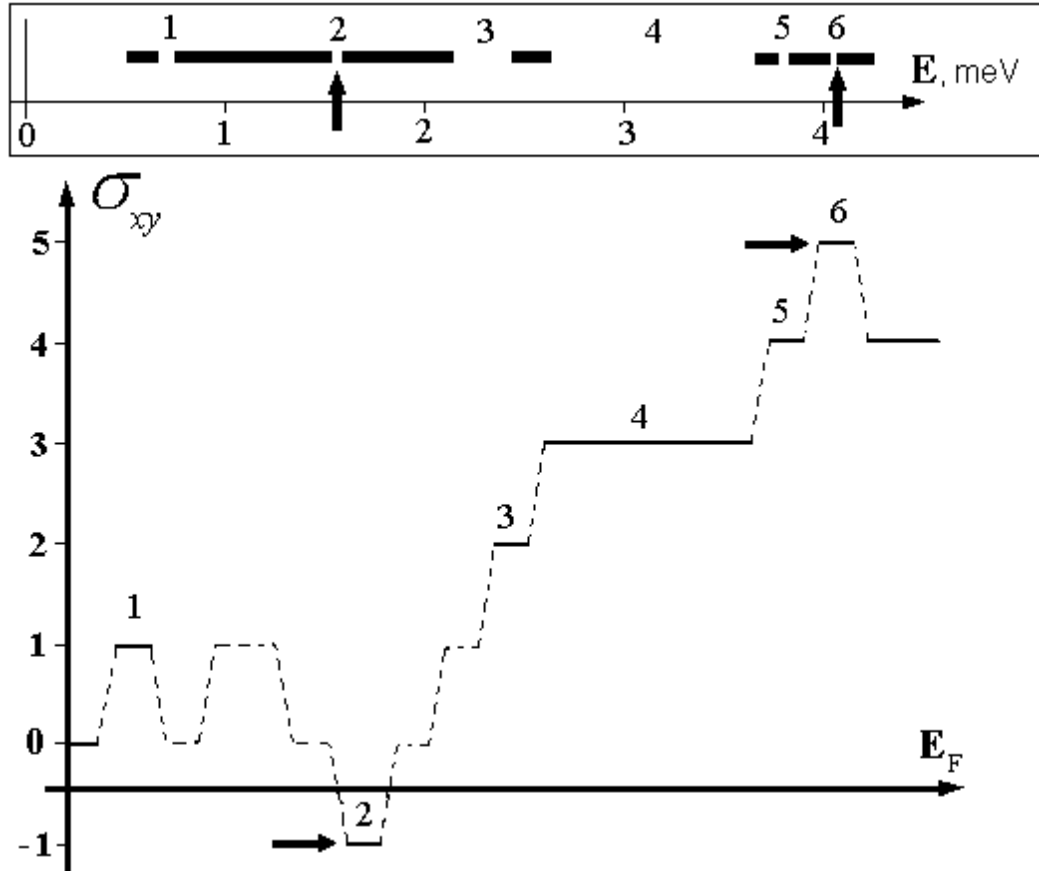


Рис. 4.5: (Вверху) система перекрывающихся (не вырожденных) магнитных подзон, происходящих из тех же уровней Ландау, что и на рис. 4.4, но расщеплённых периодическим потенциалом (1.29) с большей амплитудой $V_0 = 3$ meV. Цифрами отмечены щели в спектре. (Внизу) квантование σ_H при положении уровня Ферми в щелях спектра (жирные линии). Вклад полностью заполненных подзон внутри области их перекрытия отмечен пунктиром. Отличия в квантовании от "бабочки" Хофштадтера для электронов отмечены стрелками.

Однако, наши численные расчёты показали, что дальнейшее увеличение V_0 приводит к расталкиванию коснувшихся подзон и к снятию вырождения в спектре. Поэтому при больших V_0 применение формулы (1.49) вновь становится допустимым даже при условии $|V_0| > |\Delta E_{12}|$, т.е. в системе перекрывающихся подзон, коль скоро спектр является невырожденным. Пример такого спектра при $V_0 = 3$ мэВ показан в верхней части рис. 4.5. Можно видеть, что увеличение амплитуды потенциала привело к снижению общего числа и максимальной ширины щелей в спектре по сравнению со спектром, показанным на рис. 4.4. Для удобства мы занумеровали последовательно оставшиеся щели и соответствующие им холловские плато на рис. 4.5. Вновь штриховая линия обозначает изменение холловской проводимости, обусловленное вкладом полностью заполненных магнитных подзон вне щелей спектра, на этот раз внутри области перекрытия подзон. Необычно высокое и необычно низкое (отрицательное) значения σ_H отмечены стрелками. Необходимо отметить, что появление отрицательных значений σ_H в некоторых щелях спектра предсказывалось и для 2D электронного газа в периодическом потенциале [90, 20]. Заметим также, что всё различие между квантованием σ_H на рисунках 4.4 и 4.5 обусловлено всего лишь двумя изменениями во вкладах отдельных подзон, именно, в подзонах $\alpha = 4$ и $\alpha = 8$ с центрами на энергиях E_4 и E_8 (см. рис. 4.4). Нами было установлено, что данные подзоны проходят через вырождение с соседними при некоторых промежуточных значениях V_0 , больших, чем на рис. 4.4, но меньших, чем на рис. 4.5. Можно предположить, что в соответствии с топологическими представлениями [25, 96] касания под-

зон вызвали перераспределение классов Черна на величину $\Delta c = \pm q$, где $q = 2$. Действительно, можно легко проверить, что всё различие между рисунками 4.4 и 4.5 обусловлено следующим перераспределением в проводимости подзон: изменение проводимости на -2 на рис. 4.5 в подзоне E_4 по сравнению с рис. 4.4) и, соответственно, изменение проводимости на $+2$ на рис. 4.5 в подзоне E_8 по сравнению с рис. 4.4.

Описанные простые и качественные по своей природе результаты позволяют надеяться, что предсказанные нами зависимости в квантовании холловской проводимости дырочного газа во внешнем периодическом потенциале могут быть обнаружены экспериментально.

Заключение

Сформулируем основные результаты работы.

1. В приближении сильной связи найдено выражение для электронной волновой функции, удовлетворяющей условиям Пайерлса при трансляциях в магнитном поле в трёхмерных кристаллических решётках. Показано, что уравнение Шрёдингера для такой функции представляет собой обобщение уравнения Харпера на трёхмерный случай.
2. Для электронных состояний в металлах, помещённых в сверхсильное магнитное поле, построены новые поверхности Ферми, геометрия которых определяется величиной магнитного потока, а также взаимной ориентацией кристаллической решётки и магнитного поля.

3. Анализ строения новых поверхностей Ферми позволяет предсказать новые физические эффекты, возникающими в электронном газе одновалентных металлов с ГЦК решёткой. В частности, показана возможность фазовых переходов металл-полуметалл, парамагнетизма электронного газа и серий осцилляций де Гааза - Ван Альфена с периодами, определяемыми геометрией новой поверхности Ферми.
4. Найдены выражения для многокомпонентных квантовых состояний, удовлетворяющие условиям Пайерлса при трансляциях в магнитном поле. Расчёты проведены на примере дырок в гетеропереходе GaAs/AlGaAs *p*- типа с поверхностной сверхрешёткой квантовых точек. В широком интервале магнитных полей найдены энергетические спектры типа "бабочки" Хофштадтера и рассчитаны четырёхкомпонентные волновые функции.
5. Рассчитаны вероятности магнитооптических переходов между уровнями мелких донорных примесей, локализованных в гетеропереходе, и дырочными магнитными подзонами. Обнаружено, что переходы в магнитные подзоны, принадлежащие различным уровням Ландау, характеризуются различной поляризацией и интенсивностью излучения.
6. Получен закон квантования холловской проводимости двумерного дырочного газа в периодическом потенциале. Показано, что четырёхкомпонентным дырочным состояниям может быть сопоставлен топологический инвариант (первый класс Черна), определяю-

щий холловскую проводимость заполненных магнитных подзон.

Автор выражает глубокую благодарность своему научному руководителю профессору В.Я. Демиховскому за его неоценимую поддержку на всех этапах подготовки настоящей работы, плодотворное сотрудничество и критические замечания, способствовавшие появлению этой рукописи.

Автор признателен коллективу кафедры теоретической физики ННГУ, в особенности доценту А.А. Перову за постоянное внимание и сотрудничество при подготовке диссертации, а также профессору А.М. Сатанину за полезные критические замечания. Диссертация была выполнена при финансовой, организационной и информационной поддержке Научно - образовательному Центра физики и технологии твердотельных наноструктур ННГУ.

Библиография

- [1] P.G. Harper, *Single band motion of conduction electrons in a uniform magnetic field*, Proc. Phys. Soc. A, V.68, No.10, P.874-878 (1955).
- [2] P.G. Harper, *The general motion of conduction electrons in a uniform magnetic field, with application to the diamagnetism of metals*, Proc. Phys. Soc. A, V.68, No.10, P.879-892 (1955).
- [3] Г.Е. Зильберман, *Электрон в периодическом электрическом и однородном магнитном полях. I.*, ЖЭТФ, т.32, вып.2, с.296-304 (1957).
- [4] Г.Е. Зильберман, *Электрон в периодическом электрическом и однородном магнитном полях. II.*, ЖЭТФ, т.33, вып.2(8), с.296-304 (1957).
- [5] М.Я. Азбель, *Энергетический спектр электрона проводимости в магнитном поле*, ЖЭТФ, т.46, вып.3, с.929-945 (1964).
- [6] J.Zak, *Magnetic Translation Group*, Phys. Rev., V.134, No.6A, P.A1602-A1606 (1964).
- [7] J.Zak, *Magnetic Translation Group. II. Irreducible Representations*, Phys. Rev., V.134, No.6A, P.A1607-A1611 (1964).

- [8] D.R. Hofstadter, *Energy levels and wave functions of Bloch electrons in rational and irrational magnetic field*, Phys. Rev. B, V.14, No.6, P.2239-2249 (1976).
- [9] D.J. Thouless, M. Kohmoto, M.P. Nightingale, and M. den Nijs, *Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential*, Phys. Rev. Lett., V.49, No.6, P.405-408 (1982).
- [10] H. Silberbauer, *Magnetic minibands in lateral semiconductor superlattices*, J. Phys.: Condens. Matter, iss.4, P.7355-7364 (1992).
- [11] D. Pfannkuche and R.R. Gerhardts, *Theory of magnetotransport in two-dimensional electron systems subjected to weak two-dimensional superlattice potentials*, Phys. Rev. B, V.46, No.19, P.12606-12626 (1992).
- [12] D. Springsguth, R. Ketzmerick, and T. Geisel, *Hall conductance of Bloch electrons in a magnetic field*, Phys. Rev. B, V.56, No.4, P.2036-2043 (1997).
- [13] В.Я. Демиховский, А.А. Перов, *Оптические переходы и циклотронный резонанс на уровнях Ландау, расщеплённых периодическим потенциалом*, ЖЭТФ, т.114, вып.5(11), с.1795-1803 (1998).
- [14] V.Ya. Demikhovskii, A.A. Perov, *Eigenstates of Bloch electrons in a high magnetic field. Magneto-optical properties*, Phys. Low-Dim. Struct., iss.7/8, P.135-146 (1998).

- [15] B.A.Boyko, A.I.Bykov, M.I.Dolotenko et al, The VIIIth Int. Conf. on Megagauss Magnetic Field Generation and Related Topics, Tallahassee, USA, 1998. Book of Abstracts, P.149.
- [16] D. Weiss, P. Grambow, K. von Klitzing, A. Menschig, and G. Weimann, *Fabrication and characterization of deep mesa etched "anti"-dot superlattices in GaAs-AlGaAs heterostructures*, Appl. Phys. Lett., V.58, No.25, P.2960-2962 (1991).
- [17] D. Weiss, M.L. Roukes, A. Menschig et al., *Electron pinball and commensurate orbits in a periodic array of scatters*, Phys. Rev. Lett., V.66, No.21, P.2790-2793 (1991).
- [18] T. Schlösser, K. Ensslin, J.P. Kotthaus et al., *Landau subbands generated by a lateral electrostatic potential – chasing the Hofstadter's butterfly*, Semicond. Sci. Technol., iss.11, P.1582-1585 (1996).
- [19] T. Schlösser, K. Ensslin, J.P. Kotthaus and M. Holland, *Internal structure of a Landau band induced by a lateral superlattice: a glimpse of Hofstadter's butterfly*, Europhys. Lett., V.33, No.9, P.683-688 (1996).
- [20] C. Albrecht, J.H. Smet, K. von Klitzing, D.Weiss, V. Umansky, and H. Schweizer, *Evidence of Hofstadter's Fractal Energy Spectrum in the Quantized Hall Conductance*, Phys. Rev. Lett., V.86, No.1, P.147-150 (2001).
- [21] D. Weiss, *Quantum Effects in Laterally Modulated Systems*, The 15th Int. Conf. on High Magnetic Fields in Semicond. Phys. (5-9 August 2002, Oxford, UK). Book of Abstracts, P.7 (2002).

- [22] I.V. Kukushkin, D. Weiss, G. Lütjering, R. Bergmann, H. Schweizer, K. von Klitzing, K. Eberl, P. Rotter, M. Suhrke, and U. Rössler, *Manifestation of Commensurate Orbits in the Magnetoluminescence Spectrum of Electrons in Antidot Arrays*, Phys. Rev. Lett., V.79, No.9, P.1722-1725 (1997).
- [23] O.V. Volkov, V.E. Zhitomirskii, I.V. Kukushkin, W. Dietsche, K. von Klitzing, A. Fischer, and K. Eberl, *Magneto-optical spectroscopy of two-dimensional holes in GaAs/Al(x)Ga(1-x)As single heterojunctions*, Phys. Rev. B, V.56, No.12, P.7541-7548 (1997).
- [24] M. Kubisa, L. Bryja, K. Ryczko, J. Misiewicz, C. Bardot, M. Potemski, G. Ortner, M. Bayer, A. Forchel, C.B. Sørensen, *Photoluminescence investigations of two-dimensional hole Landau levels in p-type single Al_xGa_{1-x}As/GaAs heterostructures*, Phys. Rev. B, V.67, P.035305-1 – 035305-12 (2003).
- [25] M. Kohmoto, *Topological Invariant and the Quantization of the Hall Conductance*, Ann. Phys. (NY), V.160, No.2, P.343-354 (1985).
- [26] Н.А. Усов, *К теории квантового эффекта Холла в двумерном периодическом потенциале*, ЖЭТФ, т.94, вып.12, с.305-319 (1988).
- [27] F.H. Claro and G.H. Wannier, *Magnetic subband structure of electrons in hexagonal lattices*, Phys. Rev. B, V.19, No.12, P.6068-6074 (1979).

- [28] P.S. Sandhu, Ju. H. Kim, J.S. Brooks *Origin of anomalous magnetic breakdown frequencies in quasi-two-dimensional organic conductors*, Phys. Rev. B, V.56, No.18, P.11566-11570 (1997).
- [29] S.Y. Han, J.S. Brooks, Ju. H. Kim, *Magnetic Breakdown at High Fields: Semiclassical and Quantum Treatments*, Phys. Rev. Lett., V.85, No.7, P.1500-1503 (2000).
- [30] W.Y. Hsu and L.M. Falicov, *Level quantization and broadening for band electrons in a magnetic field: Magneto-optics throughout the band*, Phys. Rev. B, V.13, No.4, P.1595-1606 (1976).
- [31] D. Peter, D. Mayou, M. Cyrot, *Comment on "Theory of Electronic Diamagnetism in Two-Dimensional Lattices"*, Phys. Rev. Lett., V.65, No.3, P.386 (1990).
- [32] H. Hasegawa, *Generalized Flux States on 3-Dimensional Lattice*, J. Phys. Soc. Jpn., V.59, No.12, P.4384-4393 (1990).
- [33] Z. Kunszt, A. Zee, *Electron hopping in three-dimensional flux states*, Phys. Rev. B, V.44, No.13, P.6842-6848 (1991).
- [34] M. Koshino, H. Aoki, K. Kuroki, S. Kagoshima, T. Osada, *Hofstadter Butterfly and Integer Quantum Hall Effect in Three Dimensions*, Phys. Rev. Lett., V.86, No.6, P.1062-1065 (2001).
- [35] V.Ya. Demikhovskii, A.A. Perov, D.V. Khomitsky, *Formation of new Fermi surfaces in 3D crystals at ultra high magnetic field with different orientations*, Phys. Lett. A, V.267, P.408-415 (2000).

- [36] В.Я. Демиховский, Д.В. Хомицкий, *Квантовые состояния и поверхности Ферми в металлах с ГЦК решёткой, помещённых в сверхсильное магнитное поле*, ЖЭТФ, т.120, вып.1(7), с.191-204 (2001).
- [37] V.Ya. Demikhovskii and D.V. Khomitskiy, *Quantum states and optics in a p-type heterojunction with a lateral quantum dot or antidot superlattice subjected to a perpendicular magnetic field*, Phys. Rev. B, V.67, P.035321-1 – 035321-9 (2003).
- [38] В.Я. Демиховский, Д.В. Хомицкий, *Влияние поверхностных сверхрешёток на квантовые состояния и магнитооптику в гетеропереходах n- и p-типа с монослоем примесей*, Изв. Акад. Наук, Сер. Физ., т.67, вып.2, С.235-237 (2003).
- [39] В. Я. Демиховский, А. А. Перов, Д. В. Хомицкий, *Формирование новых поверхностей Ферми для блоховского электрона в 3D кристаллах, помещённых в сверхсильное магнитном поле с произвольной ориентацией*. Вестник Нижегородского университета им. Н. И. Лобачевского, сер."Физика твёрдого тела", вып.1(3), Н. Новгород, 2000, С.172-183.
- [40] V.Ya. Demikhovskii and D.V. Khomitskiy, *Quantum Hall effect in a p-type heterojunction with a lateral surface quantum dot superlattice*, [www.arXiv.org: cond-mat/0212629](http://www.arXiv.org:cond-mat/0212629) (2002).
- [41] V.Ya. Demikhovskii and D.V. Khomitsky, *Optical and transport properties of p-type heterojunctions with lateral surface superlattice in perpendicular magnetic field*, Proc. of The 10th Int. Symp.

”Nanostructures: Physics and Technology”, St. Petersburg, Russia, June 17-21, 2002, P.233-236.

- [42] В.Я. Демиховский, Д.В. Хомицкий, *Магнитооптика гетеропереходов $n(p)$ - типа с поверхностной сверхрешеткой и монослоем акцепторов (доноров)*, Всероссийское совещание ”Нанопотоника-2002” (Н. Новгород, 11-14 марта 2002г). Материалы совещания: Н. Новгород, 2002, С.85-88.
- [43] V.Ya. Demikhovskii and D.V. Khomitskiy, *Quantum Hall effect in p -type heterojunctions with lateral surface superlattice*, The 15th Int. Conf. on High Magnetic Fields in Semicond. Phys. (5-9 August 2002, Oxford, UK). Book of Abstracts, P.63 (2002).
- [44] В.Я. Демиховский, Д.В. Хомицкий, *Квантовые состояния и поверхности Ферми в 3D кристаллах, помещенных в сверхсильное магнитное поле*. Девятая Международная конференция по генерации мегагауссных магнитных полей и родственными экспериментам (Megagauss - IX), Москва - С.- Петербург, 7-14 июля 2002г. Тезисы докладов: Саров, 2002, С.55.
- [45] В.Я. Демиховский, Д.В. Хомицкий, *Квантовые состояния и магнитооптика гетероперехода $GaAs/AlGaAs$ с латеральной сверхрешеткой*. Пятая Российская конференция по физике полупроводников (Н. Новгород, 10-14 сентября 2001г). Тезисы докладов: Н. Новгород, 2001, С.133.
- [46] В.Я. Демиховский, А.А. Перов, Д.В. Хомицкий, *Формирование новых поверхностей Ферми и эффект де Гааза - Ван Альфена в 3D*

кристалле, помещённом в сверхсильное магнитное поле. 32-е Всероссийское совещание по физике низких температур (Казань, 3-6 октября 2000г). Тезисы докладов секции NS "Наноструктуры и низкоразмерные системы": Казань, 2000, С.27.

- [47] В.Я. Демиховский, Д.В. Хомицкий, *Симметрия элементарной ячейки, зоны Бриллюэна и волновой функции в кристаллах, помещённых в сверхсильное магнитное поле.* XIX научные чтения имени академика Н.В. Белова (Н. Новгород, 14-15 декабря 2000г). Тезисы докладов: Н. Новгород, 2000, С.151.
- [48] В. Я. Демиховский, А. А. Перов, Д. В. Хомицкий, *Симметрия квантовых состояний и структура поверхностей Ферми в сверхсильном магнитном поле.* Конференция "Структура и свойства твёрдых тел" (Н. Новгород, 27-28 сентября 1999). Тезисы докладов: Н. Новгород, 1999, С.85.
- [49] Д.В. Хомицкий, *Магнитные блоховские состояния в гетеропереходах n- и p-типа с монослоем примесей: оптические свойства:* Седьмая Нижегородская сессия молодых ученых (21-27 апреля 2002г). Тезисы докладов: Н. Новгород, 2002.
- [50] В.Я. Демиховский, Д.В. Хомицкий, *Осцилляционные эффекты в электронном газе 3D кристаллов, помещённых в сверхсильное магнитное поле* Шестая Нижегородская сессия молодых ученых (22-27 апреля 2001г). Тезисы докладов: Н. Новгород, 2001, С.25-26.

- [51] В.Я. Демиховский, Д.В. Хомицкий, *Применение модели новых поверхностей Ферми для анализа зонной структуры и магнитных свойств кристаллов, помещенных в сверхсильное магнитное поле*. Пятая Нижегородская сессия молодых учёных (23-28 апреля 2000г). Тезисы докладов: Н. Новгород, 2000, С.84.
- [52] A. Rauh, *Degeneracy of Landau Levels in Crystals*, Phys. Stat. Sol. (b), V.65, P.K131-K135 (1974).
- [53] A. Rauh, *On the Broadening of Landau Levels in Crystals*, Phys. Stat. Sol. (b), V.69, P.K9-K13 (1975).
- [54] G.H. Wannier, *Invariance Properties of a Proposed Hamiltonian for Bloch Electrons in a Magnetic Field*, Phys. Stat. Sol. (b), V.70, P.727-735 (1975).
- [55] G.M. Obermair and G.H. Wannier, *Bloch Electrons in Magnetic Fields. Rationality, Irrationality, Degeneracy*, Phys. Stat. Sol. (b), V.76, P.217-222 (1976).
- [56] G.H. Wannier, *A Result Not Dependent on Rationality for Bloch Electrons in a Magnetic Field*, Phys. Stat. Sol. (b), V.88, P.757-765 (1978).
- [57] H. Hiramoto and M. Kohmoto, *Electronic spectral and wavefunction properties of one-dimensional quasiperiodic systems: a scaling approach*, Int. Journ. of Modern Physics, V.6, iss.3&4, P.281-320 (1992).

- [58] Y. Hasegawa, Y. Hatsugai, M. Kohmoto, G. Montambaux, *Stabilization of flux states on two-dimensional lattices*, Phys. Rev. B, V.41, No.13, P.9174-9182 (1990).
- [59] В.Я. Демиховский, А.А. Перов, *Магнитные блоховские состояния и холловская проводимость двумерного электронного газа в периодическом потенциале без центра инверсии*, Письма в ЖЭТФ, т.76, вып.10, с.723-728 (2002).
- [60] H. Doh and S.-H. Suck Solk, *Effects of electron correlations on the Hofstadter spectrum*, Phys. Rev. B, V.57, No.3, P.1312-1315 (1998).
- [61] В.Я. Демиховский, Г.А. Вугальтер, *Физика квантовых низкоразмерных структур*, М., Логос, 2000, 248с.
- [62] M. Kohmoto, Y. Hatsugai, *Peierls stabilization of magnetic-flux states of two-dimensional lattice electrons*, Phys. Rev. B, V.41, No.13, P.9527-9529 (1990).
- [63] G. Montambaux, M. Kohmoto, *Quantized Hall effect in three dimensions*, Phys. Rev. B, V.41, No.16, P.11417-11421 (1990).
- [64] И.М. Лифшиц, М.Я. Азбель, М.И. Каганов, *Электронная теория металлов*, М., Наука, 1971, 416с.
- [65] R. E. Peierls, *Zur Theorie des Diamagnetismus von Leitungselektronen*, Z. Phys., V.80, P.763-791 (1933).
- [66] Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский, *Статистическая физика, ч.2*, М., Наука, 1978, 448с.

- [67] А. Крэкнелл, К. Уонг, *Поверхность Ферми*, пер. с англ., М., Атомиздат, 1978, 352с.
- [68] Д. Шенберг, *Магнитные осцилляции в металлах*, пер. с англ., М., Мир, 1986, 678с.
- [69] Ч. Киттель, *Квантовая теория твёрдых тел*, пер. с англ., М, Наука, 1967, 492с.
- [70] J.M. Luttinger, *Quantum Theory of Cyclotron Resonance in Semiconductors: General Theory*, Phys. Rev., V.102, No.4, P.1030-1041 (1956).
- [71] D.A. Broido and L.J. Sham, *Effective masses of holes at GaAs-AlGaAs heterojunctions*, Phys. Rev. B, V.31, No.2, P.888-892 (1985).
- [72] S.-R. Eric Yang, D.A. Broido, and L.J. Sham, *Holes at GaAs - Al(x)Ga(1-x)As heterojunctions in magnetic fields*, Phys. Rev. B., V.32, No.10, P.6630-6633 (1985).
- [73] Yu.A. Bychkov and E.I. Rashba, in the *Proc. of the 17th Int. Conf. on the Phys. Semicond., San Francisco, 1984*. Springer Verlag, 1985. P.321.
- [74] G.E. Marques and L.J. Sham, *Theory of space-charge layers in narrow-gap semiconductors*, Surf. Sci., V.113, iss.1-3, P.131-136 (1982).
- [75] F. Ancilotto, A. Fasolino, and J.C. Maan, *Hole subband mixing in quantum wells: A magneto-optic study*, Phys. Rev. B, V.38, No.3, P.1788-1799 (1988).

- [76] G. Goldoni and A. Fasolino, "*Spin*" *Splitting in Asymmetric Double Quantum Wells: A Mechanism for "Spin"-Dependent Hole Delocalization*, Phys. Rev. Lett., V.69, No.17, P.2567-2570 (1992).
- [77] L.M. Roth, B. Lax, S. Zwerdling, *Theory of Magneto-Absorption Effects in Semiconductors*, Phys. Rev., V.114, No.1, P.90-104 (1959).
- [78] I.V. Kukushkin, K. von Klitzing, K. Ploog, V.B. Timofeev, *Radiative recombination of two-dimensional electrons in acceptor δ -doped GaAs - $Al_xGa_{1-x}As$ single heterojunctions*, Phys. Rev. B, V.40, No.11, P.7788-7792 (1989).
- [79] L.V. Butov, A. Zrenner, M. Shayegan, G. Abstreiter, H.C. Manoharan, *Magneto-optics of two-dimensional hole system in the extreme quantum limit*, Phys. Rev. B, V.49, No.19, P.14054-14057 (1994).
- [80] L.V. Butov, A.A. Shashkin, V.T. Dolgoplov, K.L. Campman, A.C. Gossard, *Magneto-optics of the spatially separated electron and hole layers in GaAs/ $Al_xGa_{1-x}As$ coupled quantum wells*, Phys. Rev. B, V.60, No.12, P.8753-8758 (1999).
- [81] V. Gudmundsson, R.R. Gerhardtts, *Manifestation of the Hofstadter butterfly in far-infrared absorption*, Phys. Rev. B, V.54, No.8, P.R5223-R5226 (1996).
- [82] B.E. Cole, J.M. Chamberlain, M. Henini, T. Cheng, W. Batty, A. Wittlin, J.A.A.J. Perenboom, A. Ardavan, A. Polisski, J. Singleton, *Cyclotron resonance in ultra-low-hole-density narrow*

- p-type GaAs/(Al,Ga)As quantum wells*, Phys. Rev. B, V.55, No.4, P.2503-2511 (1997).
- [83] *Квантовый эффект Холла*, под ред. Р. Пренджа и С. Гирвина, пер. с англ., М., Мир, 1989, 404с.
- [84] H. Aoki, T. Ando, *Universality of Quantum Hall Effect: Topological Invariant and Observable*, Phys. Rev. Lett., V.57, No.24, P.3093-3096 (1986).
- [85] A.H. MacDonald, *Landau-level subband structure of electrons on a square lattice*, Phys. Rev. B, V.28, No.12, P.6713-6717 (1983).
- [86] R. Rammal, G. Toulouse, M.T. Jaekel, B.I. Halperin, *Quantized Hall conductance and edge states: Two-dimensional strips with a periodic potential*, Phys. Rev. B, V.27, No.8, P.5142-5145 (1983).
- [87] I. Dana, Y. Avron, J. Zak, *Quantised Hall conductance in a perfect crystal*, J. Phys. C: Solid State Phys., V.18, P.L679-L683 (1985).
- [88] J.E. Avron, L.G. Yaffe, *Diophantine Equation for the Hall Conductance of Interacting Electrons on a Torus*, Phys. Rev. Lett., V.56, No.19, P.2084-2087 (1986).
- [89] M. Kohmoto, *Zero modes and the quantized Hall conductance of the two-dimensional lattice in a magnetic field*, Phys. Rev. B, V.39, No.16, P.11943-11949 (1989).
- [90] B. Huckestein, R.N. Bhatt, *Influence of a periodic potential on the integer quantum Hall effect*, Surf. Sci., V.305, P.438-442 (1994).

- [91] M. Kohmoto, B.I. Halperin, Y.-S. Wu, *Diophantine equation for the three-dimensional quantum Hall effect*, Phys. Rev. B, V.45, No.23, P.13488-13493 (1992).
- [92] P. Strěda, *Theory of quantised Hall conductivity in two dimensions*, J. Phys. C: Solid State Phys., V.15, P.L717-L721 (1982).
- [93] P. Strěda, *Quantised Hall effect in a two-dimensional periodic potential*, J. Phys. C: Solid State Phys., V.15, P.L1299-L1303 (1982).
- [94] R. Akis, C. Barnes, B.L. Johnson, and G. Kirczenow, *Computer simulations and edge-state analysis of the Hall effect in two-dimensional quantum-dot arrays connected to phase-randomizing reservoirs*, Phys. Rev. B, V.47, No.24, P.16382-16390 (1993).
- [95] Б.А. Дубровин, С.П. Нови́ков, *Основные состояния двумерного электрона в периодическом магнитном поле*, ЖЭТФ, т.79, вып.3(9), с.1006-1016 (1980).
- [96] С.П. Нови́ков, *Магнитно-блховские функции и векторные расщепления. Типичные законы дисперсии и их квантовые числа*, ДАН, т.257, вып.3, с.538-543 (1981).
- [97] С.П. Нови́ков, *Двумерные операторы Шрёдингера в периодических полях*, в сб. "Современные проблемы математики", т.23, М.,ВИНИТИ, 1983, С.3-32.
- [98] Y. Hatsugai, *Topological aspects of the quantum Hall effect*, J. Phys.: Condensed Matter, V.9, P.2507-2549 (1997).

- [99] Б.А. Дубровин, С.П. Новиков, А.Т. Фоменко, *Современная геометрия. Методы и приложения*, М., Наука, 1986, 760с.
- [100] J.E. Avron, R. Seiler, B. Simon, *Homotopy and Quantization in Condensed Matter Physics*, Phys. Rev. Lett., V.51, No.1, P.51-53 (1983).
- [101] Q. Niu, D.J. Thouless, Y.-S. Wu, *Quantized Hall conductance as a topological invariant*, Phys. Rev. B, V.31, No.6, P.3372-3377 (1985).
- [102] D.J. Thouless, *Quantization of particle transport*, Phys. Rev. B, V.27, No.10, P.6083-6087 (1983).
- [103] B. Simon, *Holonomy, the Quantum Adiabatic Theorem, and Berry's Phase*, Phys. Rev. Lett., V.51, No.24, P.2167-2170 (1983).
- [104] M. Kohmoto, *Berry's Phase of Bloch Electrons in Electromagnetic Fields*, J. Phys. Soc. Japan, V.62, No.2, P.659 - 663 (1993).
- [105] M.-C. Chang, Q. Niu, *Berry phase, hyperorbits, and the Hofstadter spectrum: Semiclassical dynamics in magnetic Bloch bands*, Phys. Rev. B, V.53, No.11, P.7010-7023 (1996).
- [106] J. Goryo and M. Kohmoto, *Polarization of Bloch electrons and Berry phase in the presence of electromagnetic fields*, Phys. Rev. B, V.66, P.085118-1 – 085118-8 (2002).
- [107] B. Pannetier, J. Chaussy, R. Rammal, J.C. Villegier, *Experimental Fine Tuning of Frustration: Two-Dimensional Superconducting Network in a Magnetic Field*, Phys. Rev. Lett., V.53, No.19, P.1845-1848 (1984).

- [108] Y. Hasegawa, M. Kohmoto, G. Montambaux, *Three-dimensional superconducting networks in a magnetic field*, Phys. Rev. B, V.48, No.2, P.1119-1123 (1993).
- [109] C.C. Abilio, P. Butaud, Th. Fournier, B. Pannetier, J. Vidal, S. Tedesco, B. Dalzotto, *Magnetic Field Induced Localization in a Two-Dimensional Superconducting Wire Network*, Phys. Rev. Lett., V.83, No.24, P.5102-5105 (1999).
- [110] H. Silberbauer, U. Rössler, *Quantum study of magnetotransport in antidot superlattices*, Phys. Rev. B, V.50, No.16, P.11911-11914 (1994).
- [111] J. Eroms, M. Zitzlsperger, D. Weiss, J.H. Smet, C. Albrecht, R. Fleischmann, M. Behet, J. De Boeck, and G. Borghs, *Skipping orbits and enhanced resistivity in large-diameter InAs/GaSb antidot lattices*, Phys. Rev. B, V.59, No.12, P.R7829-R7832 (1999).
- [112] G. Petschel and T. Geisel, *Bloch Electrons in Magnetic Fields: Classical Chaos and Hofstadter's Butterfly*, Phys. Rev. Lett., V.71, No.2, P.239-242 (1993).
- [113] R. Ketzmerick, K. Kruse, D. Springsguth, and T. Geisel, *Bloch Electrons in a Magnetic Field: Why Does Chaos Send Electrons the Hard Way?*, Phys. Rev. Lett, V.84, No.13, P.2929-2932 (2000).
- [114] Ю.Г. Арапов, Н.А. Городилов, В.Н. Неверов, М.В. Якунин, А.В. Германенко, Г.М. Миньков, О.А. Кузнецов, Л.К. Орлов, Р.А. Рубцова, А.Л. Чернов, *Квантовый эффект Холла в многослойных ге-*

тероструктурах $p\text{-Ge}/\text{Ge}(1-x)\text{Si}(x)$ и энергетический спектр двумерного дырочного газа в магнитном поле, Письма в ЖЭТФ, т.59, вып.4, с.247-251 (1994).

- [115] A.H. MacDonald, U. Ekenberg, *Fractional quantum Hall effect in a two-dimensional hole gas*, Phys. Rev. B, V.39, No.9, P.5959-5963 (1989).
- [116] U. Kuhl and H.-J. Stöckmann, *Microwave realization of the Hofstadter Butterfly*, Phys. Rev. Lett., V.80, No.15, P.3232-3235 (1998).