

Энергетический спектр и теплоемкость двумерных электронных систем со спин-орбитальным взаимодействием в параллельном проводящем слое магнитном поле

О.С. Шевченко¹, А.И. Копелиович²

¹*University of North Texas, 1155 Union Circle #311277, Denton, Texas 76203-5017, USA*
E-mail: exin13@gmail.com

²*Фізико-технічний інститут низких температур ім. Б.І. Веркина НАНУ*
пр. Науки, 47, г. Харьков, 61103, Украина
E-mail: kopeliovich4@gmail.com

Статья поступила в редакцию 23 октября 2015 г., после переработки 11 ноября 2015 г., опубликована онлайн 26 января 2016 г.

Методами теории возмущений и квазиклассики рассмотрен энергетический спектр квазидвумерных электронов в параллельном двумерной плоскости магнитном поле в присутствии спин-орбитального взаимодействия Рашбы и Дрессельхауза. Доказано существование пересечения ветвей спектра в продольном магнитном поле. Проанализирован тензор обратных масс электрона. Рассмотрена теплоемкость газа вырожденных электронов, показана ее связь с основными особенностями спектра.

Методами теорії збурень та квазікласики розглянуто енергетичний спектр квазідвовимірних електронів у паралельному двовимірній площині магнітному полі в присутності спин-орбітальної взаємодії Рашби та Дрессельхауза. Доведено існування перетину гілок спектра у повздовжньому магнітному полі. Проаналізовано тензор зворотніх мас електрона. Розглянуто теплоємність газу вироджених електронів, показано її зв'язок з основними особливостями спектра.

PACS: 71.20.-b Электронная плотность состояний и зонная структура кристаллов;
75.70.Tj Спин-орбитальные эффекты.

Ключевые слова: спин-орбитальное взаимодействие, электронная теплоемкость, двумерные системы, спинтроника.

Введение

Управление спином электрона — одна из центральных проблем такой развивающейся области, как полупроводниковая спинтроника. В спинтронных устройствах на основе двумерных гетероструктур существенна роль спин-орбитального взаимодействия [1]. Изучение роли спин-орбитального взаимодействия (СОВ) важно не только для решения технологических задач спинтроники, с этим взаимодействием связаны обнаруженные фундаментальные физические эффекты: спиновый эффект Холла [2], спиновый фотогальванический эффект [3].

Наличие спина у электрона приводит к расщеплению его спектра. Такое расщепление происходит не только в магнитном поле. В двумерных системах, например в инверсионных слоях, расщепление может происходить за счет СОВ в атоме и асимметрии потенциала в направлении, перпендикулярном плоскости системы. Этот эффект связан с именами Э.И. Рашбы [4] и Ж. Дрессельхауза [5], а спектр электрона в этом случае подобен спектру частиц и античастиц Дирака. Существуют полупроводниковые структуры с сильным СОВ [6], где значение энергии расщепления может иметь такой же порядок величины, что и амплитуда периодического потенциала. Также из-

вестно, что электрическое поле внешнего затвора может изменять величину СОВ Рашбы [7].

Взаимодействие Рашбы характерно для 3D-кристаллов гексагональной структуры типа A_2B_6 , а взаимодействие Дрессельхауза — для кубической структуры A_3B_5 [8].

При наличии обширной литературы о спектре двумерных электронных систем в присутствии СОВ и связанных эффектах (см., например, обзор [1]) недостаточно внимания уделено ряду аспектов, связанных с наличием или отсутствием вырождения в спектре, а также с ролью более высоких энергетических зон. Не прояснен в литературе вопрос о пересечении ветвей спектра в параллельном магнитном поле. В работе [9] утверждается, что при наличии параллельной составляющей поля пересечение отсутствует. Данные обстоятельства важны для ряда термодинамических и кинетических эффектов, которые могут наблюдаться экспериментально.

В настоящей работе рассмотрена двумерная система электронов в продольном магнитном поле с учетом эффектов Рашбы и Дрессельхауза. Особое внимание уделено вопросу о наличии вырождения в спектре и пересечении ветвей. Доказано, что пересечение ветвей сохраняется при включении параллельного магнитного поля. Вычислен тензор эффективных масс, что важно при экспериментальном изучении кинетических эффектов. Вычислена электронная теплоемкость, это позволяет проследить особенности в ее поведении как функции плотности электронов при включении магнитного поля.

В качестве потенциала, ограничивающего движение электрона в перпендикулярном проводящей плоскости направлении, в работе используется прямоугольная яма с бесконечно высокими стенками и с присутствием перпендикулярного этой плоскости электрического поля. Данный выбор потенциала соответствует модели тонкой проводящей пленки, к которой может быть приложено перпендикулярное электрическое поле для создания СОВ типа Рашбы. Конкретно эта модель относится к случаю проводника (или полупроводника) с низкой плотностью носителей, у которого радиус экранирования (толщина скин-слоя) превышает толщину пленки.

1. Постановка задачи

Рассматривается пластина конечной толщины a и площадью S , расположенная в плоскости XOY (рис. 1). Магнитное поле, постоянное и однородное, направлено вдоль оси y в плоскости пластины. Электрическое поле, также постоянное и однородное, направлено перпендикулярно пластине вдоль оси z .

Гамильтониан для электрона в поле записан в следующем виде [4,8]:

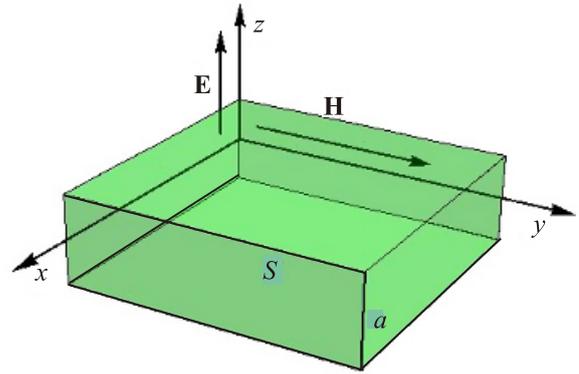


Рис. 1. Рассматриваемый объект.

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m_0} + \mu_B \mathbf{H} \hat{\boldsymbol{\sigma}} + \frac{\alpha_R}{E} [\mathbf{E}, \hat{\boldsymbol{\sigma}}] \hat{\mathbf{P}} + \alpha_D (\hat{\boldsymbol{\sigma}}_x \hat{P}_x - \hat{\boldsymbol{\sigma}}_y \hat{P}_y) - |e| \varphi + U(z), \quad (1)$$

где $\hat{\mathbf{P}} = \hat{\mathbf{p}} + (|e|\hbar/c)\mathbf{A}$ — оператор кинематического (ньютоновского) импульса, $\mu_B = |e|\hbar/(2m_0c)$, $\alpha_R = |e|\hbar E/(4m_0^2c^2)$, $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ — матрицы Паули (с множителем 1/2),

$$U(z) = \begin{cases} 0, & z \in \left[-\frac{a}{2}; +\frac{a}{2}\right] \\ \infty, & z \notin \left[-\frac{a}{2}; +\frac{a}{2}\right] \end{cases}$$

m_0 — масса свободного электрона. В гамильтониане (1) α_R — константа СОВ Рашбы, α_D — константа СОВ Дрессельхауза. Выбрана следующая калибровка потенциалов: $\varphi = -Ez$, $\mathbf{A} = (Hz, 0, 0)$.

2. Энергетический спектр

2.1. Главное приближение

Выделим в гамильтониане часть \hat{H}_0 , коммутирующую с операторами импульса \hat{p}_x и \hat{p}_y , $[\hat{H}_0, \hat{p}_x] = [\hat{H}_0, \hat{p}_y] = 0$, оставшаяся часть гамильтониана, малая в случае малости магнитного и приложенного электрического полей, будет учтена в разд. 2.2 по теории возмущений.

Гамильтониан главного приближения запишем в виде

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + \hat{\boldsymbol{\sigma}}_x (\alpha_R \hat{p}_y + \alpha_D \hat{p}_x) + \hat{\boldsymbol{\sigma}}_y (\mu_B H - \alpha_R \hat{p}_x - \alpha_D \hat{p}_y) + U(z), \quad (2)$$

где $\hat{\mathbf{p}}$ — оператор импульса.

Введем эффективное магнитное поле

$$\mathbf{H}_{\text{eff}} = \left(\frac{\alpha_R}{\mu_B} p_y + \frac{\alpha_D}{\mu_B} p_x, H - \frac{\alpha_R}{\mu_B} p_x - \frac{\alpha_D}{\mu_B} p_y, 0 \right), \quad (3)$$

где p_x и p_y — собственные значения соответствующих операторов, тем самым свдем задачу к электрону со спином в магнитном поле: $\hat{H}_0 = \hat{\mathbf{p}}^2/2m_0 + \mu_B \mathbf{H}_{\text{eff}} \hat{\boldsymbol{\sigma}} + U(z)$.

Волновые функции нулевого приближения имеют вид

$$\Psi_{n\sigma}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{Sa}} e^{i(p_x x + p_y y)/\hbar} \cos\left(\frac{\pi}{a} n z + \phi_n\right) \begin{bmatrix} 1 \\ \sigma e^{-i\eta} \end{bmatrix}, \quad (4)$$

где $\phi_n = -\pi/2$ для четных n и $\phi_n = 0$ для нечетных, $\sigma = \pm 1$,

$$\eta = \arg\left[(\alpha_R p_y + \alpha_D p_x) + i(\alpha_R p_x + \alpha_D p_y - \hbar w_H) \right],$$

где введено обозначение $w_H = |e|H/(m_0 c)$.

Энергетический спектр в главном приближении имеет вид [10]

$$\varepsilon_{n\sigma}^{(0)} = \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m_0} + \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2m_0 a^2} + \frac{\sigma}{2} \sqrt{(\alpha_R p_y + \alpha_D p_x)^2 + (\alpha_R p_x + \alpha_D p_y - \hbar w_H)^2}. \quad (5)$$

Спин-орбитальное взаимодействие приводит к двукратному расщеплению спектра. Однако при $\alpha_R, \alpha_D \neq 0$ эти две ветви пересекаются в точке

$$p_x^0 = \frac{\alpha_R}{\alpha_R^2 - \alpha_D^2} \hbar w_H, \quad p_y^0 = -\frac{\alpha_D}{\alpha_R^2 - \alpha_D^2} \hbar w_H. \quad (6)$$

В частном случае $\alpha_R = \alpha_D \neq 0, H = 0$ точка пересечения в импульсной плоскости становится прямой (см. рис. 3).

При изучении термодинамических и кинетических свойств системы с переменной за счет легирования или эффекта поля концентрацией электронов важно знать вид спектра вблизи минимумов энергии электрона. Как известно, взаимодействие Рашбы (без магнитного поля) приводит к образованию так называемой петли экстремумов [4,11] (рис. 2). Включение продольного магнитного поля снимает вырождение с основного состояния. Таким образом, при $\alpha_D = 0$ энергия минимальна в точке $p_x^{\min} = -\alpha_R m_0/2, p_y^{\min} = 0$ и равна

$$\varepsilon_{\min}^{(0)} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2} - \frac{\alpha_R^2 m_0}{8} - \frac{\hbar w_H}{2}.$$

Энергетический спектр с взаимодействием Дрессельхауза (в отсутствие поля и взаимодействия Рашбы) также имеет петлю экстремумов, однако направление спина другое, чем в случае взаимодействия Рашбы.

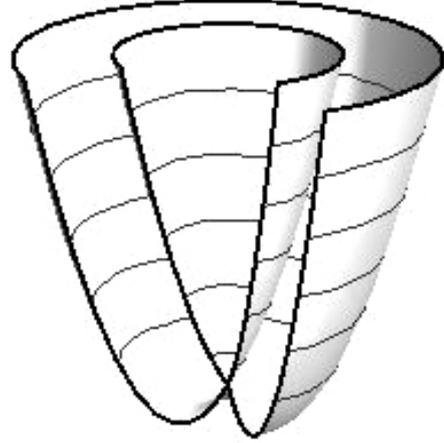


Рис. 2. Спектральная поверхность в присутствии одного из спин-орбитальных взаимодействий.

В случае $\alpha_R = 0, H \neq 0$ энергия минимальна в точке $p_x^{\min} = 0, p_y^{\min} = -\alpha_D m_0/2$ и равна

$$\varepsilon_{\min}^{(0)} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2} - \frac{\alpha_D^2 m_0}{8} - \frac{\hbar w_H}{2}.$$

Присутствие обоих взаимодействий (без магнитного поля) приводит к образованию двух минимумов в спектре (см. рис. 3), симметричных относительно начала координат: $p_x^{\min} = p_y^{\min} = \pm m_0(\alpha_R + \alpha_D)/2\sqrt{2}$, в которых энергия принимает значение

$$\varepsilon_{\min}^{(0)} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2} - \frac{m_0}{4} (\alpha_R + \alpha_D)^2.$$

Включение магнитного поля сдвигает эти точки, при этом главным минимумом становится тот, что находился в области с отрицательными проекциями импульса (см. рис. 4 и 5).

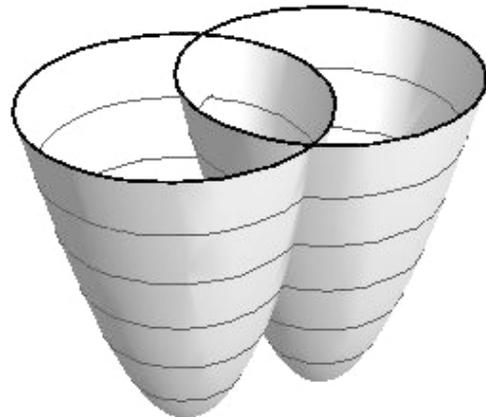


Рис. 3. Спектральная поверхность в присутствии СОВ Рашбы и СОВ Дрессельхауза.

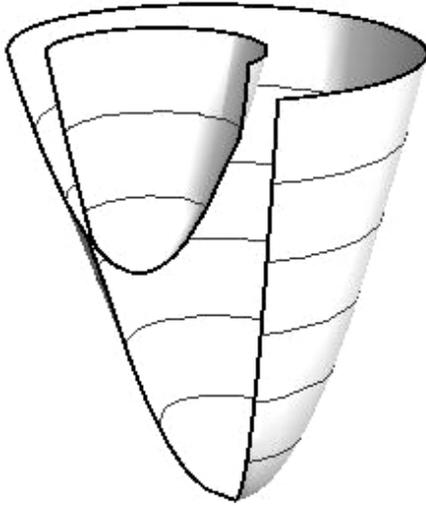


Рис. 4. Спектральная поверхность в присутствии СОВ Рашбы и продольного магнитного поля.

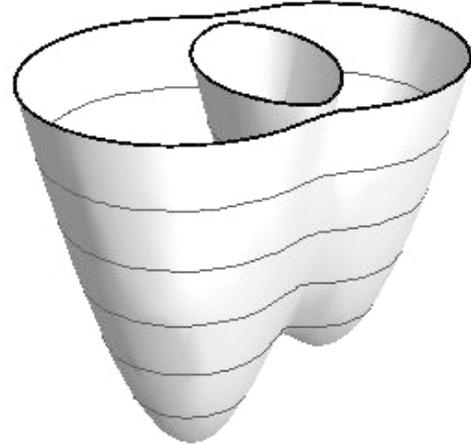


Рис. 5. Спектральная поверхность в присутствии СОВ Рашбы, СОВ Дрессельхауза и продольного магнитного поля.

2.2. Теория возмущений. Пересечение ветвей спектра

Оператор возмущения имеет вид

$$\hat{V} = (w_H p_x + |e| E)z + \frac{m_0 w_H^2}{2} z^2 + m_0 w_H z (\alpha_D \hat{\sigma}_x - \alpha_R \hat{\sigma}_y). \quad (7)$$

Его диагональные матричные элементы, дающие первую поправку к энергии, не представляют интереса, т.к. не зависят от импульса: $\epsilon_{n\sigma}^{(1)} = V_{n\sigma, n\sigma} = A_n m_0 w_H^2 a^2$. Детальный вид матричных элементов приведен в Приложении.

При рассмотрении второй поправки к энергии важно отметить, что $V_{n-, n+} = V_{n+, n-} = 0$ (здесь «+» и «-» в индексах — значения $\sigma = \pm 1$). Это означает, что прямые переходы между близкими уровнями, образованными в результате расщепления спин-орбитальным взаимодействием, отсутствуют. Следовательно, в этом порядке теории возмущений вырождение в точке (6) не снимается.

Докажем наличие пересечения ветвей в общем случае, т.е. в любом порядке теории возмущений. Гамильтониан (1) можно записать в виде $\hat{H} = \hat{H}_1 + \mathbf{T}\hat{\boldsymbol{\sigma}}$, где в \hat{H}_1 вошли все слагаемые без матриц Паули. За расщепление отвечают слагаемые гамильтониана, содержащие матрицы Паули, т.е.

$$\mathbf{T} = \mu_B \mathbf{H}_{\text{eff}} + m_0 w_H z \begin{bmatrix} \alpha_D \\ -\alpha_R \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (8)$$

Несложно проверить, что вектор $m_0 w_H z \begin{bmatrix} \alpha_D \\ -\alpha_R \\ 0 \end{bmatrix}$ параллелен \mathbf{H}_{eff} (3) при

$$p_y = -\frac{\alpha_D}{\alpha_R - \alpha_D} \hbar w_H, \quad (9)$$

что соответствует прямой в импульсной плоскости, на которой находится точка пересечения ветвей (6). Обозначим $\hat{\sigma}_p/2$ оператор проекции спина на направление вектора $(\alpha_D, -\alpha_R, 0)$. Тогда для состояний на прямой (9) гамильтониан можно записать в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + T \hat{\sigma}_p, \quad \text{где } T = (p_x - p_x^0 + m_0 w_H z) \sqrt{\alpha_R^2 + \alpha_D^2} = \\ = \left(p_x - p_x^0 + \frac{|e|}{c} A_x \right) \sqrt{\alpha_R^2 + \alpha_D^2}.$$

Такой факторизованный вид гамильтониана показывает, что слагаемое $m_0 w_H z (\alpha_D \hat{\sigma}_x - \alpha_R \hat{\sigma}_y)$ в операторе возмущения не перепутывает состояния, которые являются собственными для $\hat{\sigma}_p$ и совпадают с (4) при условии (9). Таким образом, вырождение в точке на прямой (9) не снимается, в любом порядке теории возмущений оно находится на этой прямой. Энергии же ветвей, соответствующие собственным значениям $\sigma = \pm 1$ оператора $\hat{\sigma}_p$, конечно, изменяются при учете возмущения (см. результат (10)), поэтому точка пересечения смещается вдоль указанной прямой.

Используя матричные элементы, приведенные в Приложении, найдем вторую поправку к энергии (первая найдена выше), пренебрегая слагаемым, пропорциональным w_H^4 :

$$\varepsilon_{n\sigma}^{(2)} = \frac{m_0 a^4}{\hbar^2} \left\{ G_n \left(w_H p_x + |e| E + \frac{\sigma}{2} m_0 w_H (\alpha_D \cos \eta + \alpha_R \sin \eta) \right)^2 + \frac{m_0^2 w_H^2}{4} (\alpha_D \sin \eta - \alpha_R \cos \eta)^2 g_{n\sigma}(p_x, p_y) \right\}. \quad (10)$$

Значения коэффициентов указаны в Приложении.

Из условия применимости теории возмущений следуют неравенства:

$$1) \frac{1}{n^2} \left(\frac{a}{l_H^2} \right)^4 \ll 1, \text{ что говорит о малости (как минимум для низких уровней) толщины пластины } a \text{ в сравнении с магнитной длиной } l_H = \sqrt{\frac{\hbar}{m_0 w_H}}, \text{ если толщина}$$

пленки порядка 1 см, w_H не должна превышать 10^{11} Гц;

$$2) p_x \ll \frac{\hbar^2 n^2}{m_0 w_H a^3}, \text{ что соответствует циклотронным орбитам электрона, пересекающим обе стенки пластины (в противовес случаю, когда орбита электрона «скользит» вдоль одной из стенок пластины);}$$

3) $E \ll \frac{\hbar^2 n^2}{m_0 |e| a^3}$ — верхнее ограничение на электрическое поле, при $a \approx 1$ см оно соответствует условию, что разность потенциалов на пленке меньше 10^{-2} В.

Также предполагаем СОВ относительно большим, т.е. $\hbar w_H \ll \alpha^2 m_0$, где α — меньшая из констант СОВ.

3. Эффективная масса

3.1. Расчет по теории возмущений

Важная характеристика энергетического спектра — тензор обратной эффективной массы:

$$m_{ij}^{-1} = \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial p_i \partial p_j}.$$

Оценки показывают, что малое смещение положения минимумов энергии в результате учета возмущения не влияет на величину эффективных масс, поэтому

вычисления проведены для точек абсолютных минимумов, указанных в разд. 2.1. Результаты оказываются существенно различными в случаях, когда одна из двух констант СОВ равна нулю (или достаточно мала: $\alpha_{\min}^2 \ll \hbar w_H / m_0$) и обе константы одного порядка. Ниже рассмотрим указанные случаи.

Для упрощения вычислений введем дополнительный малый параметр $\lambda_{R,D} = \alpha_{R,D} m_0 a / \hbar \ll 1$ — СОВ в районе минимумов значительно меньше разности энергий зон пространственного квантования. В главном приближении по этому параметру $g_{n\sigma}(p_x, p_y) = G_n$. Сохраняем только первые не исчезающие по данному параметру слагаемые.

1. $\alpha_R \neq 0, \alpha_D = 0$:

$$m_{xx}^{-1} = \frac{1}{m_0} + 2G_n \frac{m_0 w_H^2 a^4}{\hbar^2},$$

$$m_{yy}^{-1} = 2 \frac{\hbar w_H}{\alpha_R^2 m_0^2} - 4G_n \frac{|e| E w_H a^4}{\alpha_R \hbar^2}, \quad m_{xy}^{-1} = 0. \quad (11)$$

Равенство нулю величины m_{xy}^{-1} — следствие симметрии энергии (5), (10) при $\alpha_D = 0$ относительно замены $p_y \rightarrow -p_y$.

2. $\alpha_D \neq 0, \alpha_R = 0$:

$$m_{xx}^{-1} = 2 \frac{\hbar w_H}{\alpha_D^2 m_0^2}, \quad m_{yy}^{-1} = \frac{1}{m_0} + \frac{4}{\pi^4} \lambda_D^4 J_n \frac{m_0 w_H^2 a^4}{\hbar^2},$$

$$m_{xy}^{-1} = -4G_n \frac{|e| E w_H a^4}{\alpha_D \hbar^2}. \quad (12)$$

3. $\alpha_R, \alpha_D \gg \sqrt{\hbar w_H / m_0}$. Минимум энергии при этом расположен вблизи точки $p_x = p_y = -\alpha^+ m_0 / 2\sqrt{2}$, $\alpha^+ = \alpha_R + \alpha_D$, $\alpha^- = \alpha_R - \alpha_D$:

$$m_{xx}^{-1} = \frac{1}{m_0} - \frac{1}{2m_0} \left(\frac{\alpha^-}{\alpha^+} \right)^2 + \sqrt{2} \frac{\hbar w_H}{\alpha^{+4} m_0^2} (\alpha_R^2 - \alpha_D^2 - 4\alpha_R \alpha_D) + 3\sqrt{2} G_n \frac{|e| E w_H a^4}{\alpha^+ \hbar^2} \left(\frac{\alpha^-}{\alpha^+} \right)^2, \quad (13)$$

$$m_{yy}^{-1} = \frac{1}{m_0} - \frac{1}{2m_0} \left(\frac{\alpha^-}{\alpha^+} \right)^2 + \sqrt{2} \frac{\hbar w_H}{\alpha^{+4} m_0^2} (\alpha_R^2 - \alpha_D^2 - 4\alpha_R \alpha_D) + \sqrt{2} G_n \frac{|e| E w_H a^4}{\alpha^+ \hbar^2} \left(\frac{\alpha^-}{\alpha^+} \right)^2, \quad (14)$$

$$m_{xy}^{-1} = \frac{1}{2m_0} \left(\frac{\alpha^-}{\alpha^+} \right)^2 + 2\sqrt{2} \frac{\hbar w_H}{\alpha^{+4} m_0^2} (4\alpha_R \alpha_D - \alpha_R^2 - \alpha_D^2) + \sqrt{2} G_n \frac{|e| E w_H a^4}{\alpha^+ \hbar^2} \left(\frac{\alpha^-}{\alpha^+} \right)^2. \quad (15)$$

Заметим, что случай $\alpha_R = \alpha_D$ особый, в этом случае в энергию (5) и (10) при $g_{n\sigma}(p_x, p_y) = G_n$ и в низшем приближении по w_H СОВ входит в виде линейной по импульсу добавки $\alpha^+(p_x + p_y)/\sqrt{2}$ (угол η не зависит от импульса), поэтому соответствующие добавки к эффективной массе исчезают.

Во всех трех рассмотренных ситуациях масса зависит от номера уровня, но индекс n для простоты записи опущен. Введенные константы приведены в Приложении.

Полученные выражения приводят к следующим видам.

1. Зависимость эффективных масс от магнитного поля и СОВ сингулярная, что является следствием наличия петли экстремумов в спектре. Таким образом, данные величины крайне чувствительны к изменению указанных переменных. В отсутствие СОВ (и поля) обратная масса равна $1/m_0$, при появлении СОВ (одного из двух типов) средняя по кольцу экстремумов обратная масса, как легко понять, равна $1/2m_0$. Сколь угодно малое магнитное поле, снимая кольцевое вырождение, скачком приводит к иному значению обратных масс, указанному в формулах выше.

2. При преобладании СОВ Рашбы магнитное поле увеличивает эффективную массу электрона в направлении x при $n=1$ и уменьшает ее при $n>1$ ($G_1 < 0$, $G_{n>1} > 0$, см. табл. 1). Заметим, что этот результат связан с выбранной моделью потенциала $U(z)$, обеспечивающего двумерность. При преобладании СОВ Дресельхауза масса в направлении x велика — обратно пропорциональна малым параметрам задачи.

3. Компонента обратной массы m_{xy}^{-1} быстро возрастает при появлении дополнительного типа СОВ, что может быть обнаружено измерением недиагональной компоненты тензора электропроводности при варьировании СОВ Рашбы изменением приложенного электрического поля.

Добавки к массе, содержащие константу G_n , численно невелики, поскольку уже $G_1 \sim 10^{-3}$ (см. следующий подраздел). Они могут быть обнаружены в

точных измерениях компонент тензора электропроводности, поскольку изменяют их зависимость от магнитного поля. Изменение же эффективной массы с магнитным полем, энергия электрона в котором $\hbar w_H$, достигает значения характерной энергии СОВ $\alpha^2 m_0$ и может быть порядка самой массы; циклотронной частоте поля порядка 10^{11} Гц соответствует энергия СОВ 10^{-4} эВ.

3.2. Квазиклассика

Поскольку определение эффективной массы в рамках теории возмущений требует вычисления бесконечных сумм, для получения аналитического результата используем квазиклассику. Данный метод дает асимптотически точный результат для больших n . Для простоты учтем только продольное магнитное поле без спин-орбитального взаимодействия ($\alpha_R = 0, \alpha_D = 0, H \neq 0$), так как добавка к интересующей нас компоненте m_{xx}^{-1} не зависит от констант спин-орбитального взаимодействия. Введя обозначения

$$\epsilon' = \epsilon - \mu_B H_{\text{eff}} \sigma + \frac{(p_x + |e| E/w_H)^2 - p_x^2 - p_y^2}{2m_0},$$

$$z_0 = -\frac{p_x + |e| E/w_H}{m_0 w_H},$$

получаем уравнение Шредингера

$$\chi''(z) + \frac{2m_0}{\hbar^2} \left(\epsilon' - \frac{m_0 w_H^2}{2} (z - z_0)^2 - U(z) \right) \chi(z) = 0$$

для частицы в потенциале $U_{\text{eff}}(z) = (m_0 w_H^2 / 2)(z - z_0)^2 + U(z)$, z -компонента квазиимпульса которой равна

$$p_z = \sqrt{2m_0(\epsilon' - U_{\text{eff}}(z))} \approx$$

$$\approx \sqrt{2m_0\epsilon'} \left(1 - \frac{m_0 w_H^2}{4\epsilon'} (z - z_0)^2 - \frac{m_0^2 w_H^4}{32\epsilon'^2} (z - z_0)^4 \right)$$

Таблица 1. Значения коэффициентов в добавке к m_{xx}^{-1}

n	$2G_n$	$[12\pi^2(n + 1/4)^2]^{-1}$	$[12\pi^2(n + 1/2)^2]^{-1}$	$[12\pi^2(n + 3/4)^2]^{-1}$
1	-0,0044	0,0054	0,0038	0,0028
3	0,00078	0,00080	0,00069	0,00060
5	0,00032	0,00031	0,00028	0,00026
7	0,00017	0,00016	0,00015	0,00014
9	0,00010	0,000099	0,000094	0,000089
11	0,000069	0,000067	0,000064	0,000061
13	0,000050	0,000048	0,000046	0,000045
15	0,000037	0,000036	0,000035	0,000034
17	0,000029	0,000028	0,000028	0,000027

(разложение соответствует орбитам, пересекающим обе стенки пластины, части орбиты внутри пластины — почти отрезки прямых).

Правило квантования:

$$\int_0^a p_z dz \approx \sqrt{2m_0 \epsilon'} \left((z - z_0) - \frac{m_0 w_H^2}{12 \epsilon'} (z - z_0)^3 - \frac{m_0^2 w_H^4}{160 \epsilon'^2} (z - z_0)^5 \right) \Big|_0^a = \pi \hbar (n + \gamma).$$

Применяя к этому уравнению метод последовательных приближений по уже использованному малому параметру, найдем выражение для энергии:

$$\begin{aligned} \epsilon = & \frac{p_x^2 + p_y^2}{2m_0} + \mu_B H_{\text{eff}} \sigma + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_0 a^2} (n + \gamma)^2 + \\ & + \frac{m_0 w_H^2 a^2}{6} \left(1 + \frac{m_0^2 w_H^2 a^4}{15 \pi^2 \hbar^2 (n + \gamma)^2} \right) - \\ & - \frac{m_0 w_H^2 a}{2} z_0 \left(1 + \frac{m_0^2 w_H^2 a^4}{12 \pi^2 \hbar^2 (n + \gamma)^2} \right) + \frac{m_0^3 w_H^4 a^4}{24 \pi^2 \hbar^2 (n + \gamma)^2} z_0^2. \end{aligned} \quad (16)$$

Обратная эффективная масса в данном случае будет равна

$$\frac{\partial^2 \epsilon}{\partial p_x^2} = \frac{1}{m_0} + \frac{m_0 w_H^2 a^4}{12 \pi^2 \hbar^2 (n + \gamma)^2}.$$

Как нетрудно понять, малые параметры приведенного выше разложения величины p_z совпадают с использованными при применении теории возмущений в разд. 3.1. Поэтому разумно сравнить результаты обоих подходов.

Видно, что добавка к обратной массе свободного электрона в квазиклассическом расчете будет везде положительной и убывать с ростом n , что соответствует результату теории возмущений для $n \geq 2$. Также стоит отметить наилучшее совпадение результатов при $\gamma = 1/4$ для $n \geq 3$.

Ранее в работе [12] была вычислена эффективная масса электрона в плоскости при наличии магнитного поля. Путем усреднения циклотронного движения было показано, что масса увеличивается в направлении, перпендикулярном полю, причем добавка к массе пропорциональна квадрату величины магнитного поля.

4. Теплоемкость

Особенности электронного спектра могут быть выявлены экспериментально в измерениях теплоемкости как функции концентрации электронов.

Рассмотрим теплоемкость вырожденного электронного газа ($T \ll \epsilon_F$, ϵ_F — энергия Ферми), спектр которого обсуждался выше. Мы ограничились рассмотрением случая заполнения только нижней зоны размерного квантования, поэтому результаты не содержат толщины пластины.

В отсутствие магнитного поля и при наличии только взаимодействия Рашбы ($\alpha_R \neq 0$, $\alpha_D = 0$, $H = 0$) изоэнергетические кривые в p -пространстве — концентрические окружности, кольца между которыми содержат состояния с энергией, меньшей заданной (ниже пересечения ветвей спектра могут быть только состояния с $\sigma = -1$). В области энергий выше точки пересечения состояния в пределах внутренней окружности учитываются повторно (за счет появления состояний с $\sigma = +1$).

Число состояний электронов известным образом связано с площадью в p -пространстве S_p :

$$\Gamma = \frac{S}{(2\pi\hbar)^2} S_p.$$

Введем энергию, отсчитываемую от ее минимального значения:

$$\epsilon' = \epsilon_{1\sigma}^{(0)} - \left(\epsilon_{1\sigma}^{(0)} \right)_{\min} = \frac{p^2}{2m_0} + \frac{1}{2} \alpha_R \sigma p + \frac{\alpha_R^2 m_0}{8}.$$

Пересечению ветвей спектра соответствует $\epsilon' = \alpha_R^2 m_0 / 8$.

Для $\epsilon' < \alpha_R^2 m_0 / 8$ радиусы окружностей при фиксированном значении энергии $p_{\pm} = \alpha_R m_0 / 2 \pm \sqrt{2m_0 \epsilon'}$, $S_p = \pi(p_+^2 - p_-^2) = 2\pi \alpha_R m_0^{3/2} \sqrt{2\epsilon'}$.

Для $\epsilon' > \alpha_R^2 m_0 / 8$ радиус внешней окружности при фиксированном значении энергии по-прежнему равен $p_+ = \alpha_R m_0 / 2 + \sqrt{2m_0 \epsilon'}$, что соответствует ветви $\sigma = -1$, а радиус внутренней окружности будет равен $p_- = \sqrt{2m_0 \epsilon'} - \alpha_R m_0 / 2$, что соответствует ветви $\sigma = +1$,

$$S_p = \pi(p_+^2 + p_-^2) = \frac{\pi m_0}{2} (\alpha_R^2 m_0 + 8\epsilon').$$

Плотность состояний равна

$$v(\epsilon') = \begin{cases} \frac{\alpha_R m_0^{3/2} S}{2\pi\hbar^2} \frac{1}{\sqrt{2\epsilon'}}, & \epsilon' < \frac{\alpha_R^2 m_0}{8}, \\ \frac{m_0 S}{\pi\hbar^2}, & \epsilon' \geq \frac{\alpha_R^2 m_0}{8} \end{cases} \quad (17)$$

(ее вид приведен на рис. 6).

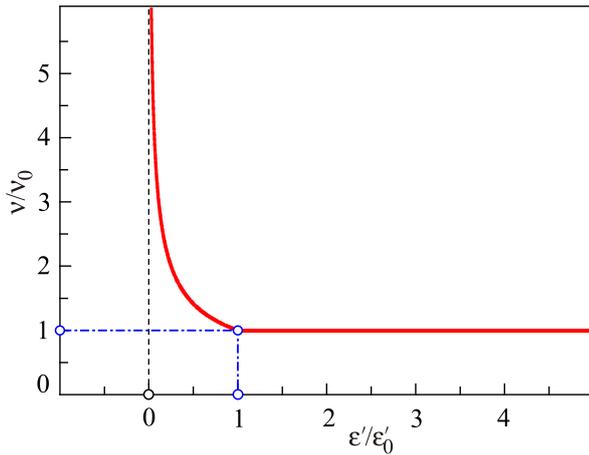


Рис. 6. Зависимость плотности состояний от энергии (17) для случая СОВ Рашбы $\epsilon'_0 \equiv \alpha_R^2 m_0 / 8$, $v_0 = m_0 S / (\pi \hbar^2)$.

Производная плотности состояний по энергии имеет вид

$$v'(\epsilon') = \begin{cases} -\frac{\alpha_R S}{2\pi \hbar^2} \left(\frac{m_0}{2\epsilon'}\right)^{3/2}, & \epsilon' < \frac{\alpha_R^2 m_0}{8}, \\ 0, & \epsilon' \geq \frac{\alpha_R^2 m_0}{8}, \end{cases}$$

она претерпевает скачок величиной $4S/(\pi \alpha_R^2 \hbar^2)$.

Прохождение энергии Ферми через точку пересечения ветвей, т.е. через дираковскую точку в спектре, — это двумерный аналог топологического перехода типа разрыва переключки [13]. Как видим, данный переход сопровождается скачком производной плотности состояний.

Энергия Ферми при $\epsilon' < \alpha_R^2 m_0 / 8$

$$\epsilon_F = N^2 \frac{2\pi^2 \hbar^4}{\alpha_R^2 m_0^3 S^2},$$

где учтено, что при $T = 0$: $\Gamma = N$ — число электронов, $\epsilon' = \epsilon_F$.

Для вырожденного электронного газа удельная теплоемкость, как известно, равна

$$C_V = \frac{\pi^2 k^2}{3} v(\epsilon_F) T$$

(k — постоянная Больцмана), т.е. в рассматриваемой ситуации

$$C_V = \begin{cases} \frac{\alpha_R^2 m_0^3 S^2 k^2}{12 \hbar^4 N} T, & N < N_0 \\ \frac{\pi m_0 S k^2}{3 \hbar^2} T, & N \geq N_0 \end{cases}, \text{ где } N_0 = \frac{\alpha_R^2 m_0^2 S}{4 \pi \hbar^2}. \quad (18)$$

Как известно, из теоремы Нернста следует, что в области низких температур разность $C_P - C_V$ — ве-

личина более высокого порядка малости, чем сама теплоемкость. Поэтому индекс у теплоемкости далее опускаем.

Из полученных выражений для плотности состояний (17) и теплоемкости (18) видно, что при $\epsilon' < \alpha_R^2 m_0 / 8$ изучаемая нами двумерная система ведет себя как одномерная ($v \propto \epsilon^{-1/2}$, $C \propto N^{-1}$), т.е. спин-орбитальное взаимодействие Рашбы приводит к эффективному понижению размерности системы.

В случае, когда присутствует только взаимодействие Дрессельхауза, наблюдается аналогичная ситуация (нужно заменить α_R на α_D).

Рассмотрим влияние продольного магнитного поля, причем ограничимся только вкладом областей вблизи минимумов спектра (ниже точки пересечения ветвей).

Квадратичное разложение энергии вблизи минимума (при условии $\alpha_R^2 m_0 \gg \hbar w_H / 2$) имеет вид

$$\epsilon' \approx \frac{(p_x + \alpha_R m_0 / 2)^2}{2m_0} + \frac{\hbar w_H p_y^2}{\alpha_R^2 m_0^2} = \frac{p'^2}{2m_0}.$$

Найдем те же термодинамические параметры при малых плотностях электронов $N/S \ll (\alpha_R / \hbar^2) \sqrt{\hbar w_H}$:

$$\Gamma = \frac{\alpha_R m_0^{3/2} S}{2\sqrt{2} w_H \pi \hbar^{3/2}} \epsilon', \quad \epsilon_F = \frac{2\sqrt{2} w_H \pi \hbar^{3/2}}{\alpha_R m_0^{3/2} S} N,$$

$$v(\epsilon') = \frac{\alpha_R m_0^{3/2} S}{2\sqrt{2} w_H \pi \hbar^{3/2}} = \frac{\Gamma}{\epsilon'}, \quad C = \frac{\pi k^2 \alpha_R m_0^{3/2} S}{6\sqrt{2} w_H \pi \hbar^{3/2}} T. \quad (19)$$

Видно, что магнитное поле сняло «размерный эффект», вызванный взаимодействием Рашбы, т.к. эти зависимости от энергии и плотности электронов уже характерны для двумерного электронного газа. Теплоемкость (19) оказывается сингулярной при $H = 0$ функцией магнитного поля; очевидно, что бесконечный скачок сглаживается в пределах $\Delta w_H \approx \tau^{-1}$, kT/\hbar , τ — время свободного пробега электрона.

Для полноты картины рассмотрим случай, когда присутствуют одновременно взаимодействия и Рашбы, и Дрессельхауза (без магнитного поля). В этом случае изоэнергетические кривые вблизи двух симметричных относительно начала координат минимумов энергии имеют вид эллипсов с полуосями $p_1 = \sqrt{2m_0 \epsilon'}$, $p_2 = b\sqrt{2m_0 \epsilon'}$, где $b = (\alpha_R + \alpha_D) / (2\sqrt{\alpha_R \alpha_D})$. Достаточно рассмотреть одну из этих точек ($p_x = p_y = m_0(\alpha_R + \alpha_D) / 2\sqrt{2}$), а затем удвоить результат:

$$\Gamma = \frac{m_0 S}{\pi \hbar^2} b \epsilon', \quad \epsilon_F = \frac{\pi \hbar^2}{m_0 S b} N, \quad C = \frac{\pi k^2 m_0 S b}{3 \hbar^2} T. \quad (20)$$

Зависимости от концентрации в (20) также соответствуют размерности 2D. Включение магнитного поля скачком уменьшает теплоемкость вдвое, поскольку минимуму будет соответствовать одна из рассмотрен-

ных двух точек; эта сингулярность сглаживается, как указано в предыдущем рассмотренном случае. Рост теплоемкости при стремлении к нулю одной из констант СОВ ограничен ее значением, найденным выше для случая одной константы при низких плотностях электронов.

Заключение

Рассмотрена задача о пластине с электронным газом в присутствии продольного магнитного поля и спин-орбитальных взаимодействий Рашбы и Дрессельхауза. В рамках теории возмущений исследован энергетический спектр электрона. Доказано, что продольное магнитное поле не снимает пересечения ветвей спектра, обусловленного спин-орбитальным взаимодействием. Исследована сингулярная зависимость компонент обратной эффективной массы от параметров спин-орбитального взаимодействия и магнитного поля, подобная зависимость может быть обнаружена в экспериментах по электропроводности. Методами теории возмущений и квазиклассики показано, что магнитное поле приводит

к добавке к массе электрона, знак которой зависит от номера энергетической зоны. Показано, что зависимость теплоемкости от концентрации электронов отражает основные особенности спектра, в частности, эффективное понижение размерности системы, наличие дираковской точки в спектре. Учет конечной толщины проводника позволил найти границы применимости теории бесконечно тонкого 2D проводника и рассмотреть возникающий в этой связи новый эффект изменения эффективной массы носителей.

Мы благодарны А.В. Марчукову за участие в работе на начальной ее стадии.

Работа выполнена при частичной поддержке проекта №4/15-Н НАН Украины.

Приложение

Матричные элементы и введенные обозначения

При записи матричных элементов опустим второе слагаемое в (7), квадратичное по z , поскольку оно не влияет на изложенные результаты:

$$V_{n\sigma, m\sigma'} = -\frac{4a^2 nm}{\pi^2 (n^2 - m^2)^2} \left(\delta_{\sigma\sigma'} \left[w_H p_x + |e|E + \frac{\sigma}{2} m_0 w_H (\alpha_D \cos \eta + \alpha_R \sin \eta) \right] + i\delta_{\sigma, -\sigma'} \sigma m_0 w_H (\alpha_D \sin \eta - \alpha_R \cos \eta) \right).$$

Здесь n и m — числа разной четности, в противном случае $V_{n\sigma, m\sigma'} = 0$.

Обозначения в энергетических поправках (суммирование ведется по четным m , если n — нечетное, и по нечетным, если n — четное):

$$A_n = \frac{1}{24} \left(1 - \frac{6}{\pi^2 n^2} \right); \quad G_n = \sum_m G_{nm}, \text{ где } G_{nm} = \frac{128 n^2 m^2}{\pi^6 (n^2 - m^2)^5};$$

$$g_{n\sigma}(p_x, p_y) = \sum_m \frac{G_{nm}(n^2 - m^2)}{n^2 - m^2 + \sigma \frac{2m_0 a^2}{\pi^2 \hbar^2} \sqrt{(\hbar w_H - \alpha_R p_x - \alpha_D p_y)^2 + (\alpha_D p_x + \alpha_R p_y)^2}};$$

$$J_n = \sum_m J_{nm}, \text{ где } J_{nm} = \frac{G_{nm}}{(n^2 - m^2)^2}.$$

1. M.W. Wu, J.H. Jiang, and M.Q. Weng, *Phys. Rep.* **493**, 61 (2010).
2. S. Murakami, N. Nagaosa, and S.C. Zhang, *Science* **301**, 1348 (2003).
3. S.D. Ganichev, V.V. Bel'kov, P. Schneider, E.L. Ivchenko, S.A. Tarasenko, W. Wegscheider, D. Weiss, D. Schuh, E.V. Beregulin, and W. Prettl, *Phys. Rev. B* **68**, 035319 (2003).
4. Э.И. Рашба, *ФТТ* **2**, 1224 (1960).
5. G. Dresselhaus, *Phys. Rev.* **100**, 580 (1955).
6. K. Ishizaka, M.S. Bahramy, H. Murakawa, M. Sakano, T. Shimojima, T. Sonobe, K. Koizumi, S. Shin, H. Miyahara, A. Kimura, K. Miyamoto, T. Okuda, H. Namatame,

- M. Taniguchi, R. Arita, N. Nagaosa, K. Kobayashi, Y. Murakami, R. Kumai, Y. Kaneko, Y. Onose, and Y. Tokura, *Nature Materials* **10**, 521 (2011).
7. J.B. Miller, D.M. Zumbühl, C.M. Marcus, Y.B. Lyanda-Geller, D. Goldhaber-Gordon, K. Campman, and A.C. Gossard, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 076807 (2003).
8. E.I. Rashba, *Physica E: Low-Dimensional Systems and Nanostructures* **34**, 31 (2006).
9. Ю.А. Бычков, *ФТТ* **30**, 3672 (1988).
10. M. Valin-Rodríguez and R.G. Nazmitdinov, *Phys. Rev. B* **73**, 235306 (2006).
11. Э.И. Рашба, *ВФЖ* **84**, 557 (1964).

12. F. Delebecque-Fendt, F. Mehats, *Commun. Math. Phys.* **292**, 829 (2009).
13. И.М. Лифшиц, М.Я. Азбель, М.И. Каганов, *Электронная теория металлов*, Наука, Москва (1971).

Energetic spectrum and specific heat of two-dimensional electron systems with spin-orbit interaction in magnetic field parallel to conducting layer

O.N. Shevchenko and A.I. Kopeliovich

The energy spectrum of the quasi-two-dimensional electron gas in the in-plane magnetic field is studied by means of the perturbation theory and quasiclassical approach, taking into account Rashba and Dresselhaus

spin-orbit interactions. The existence of the intersection of energy sublevels in electron spectrum is demonstrated. The reciprocal mass tensor of electrons is analyzed. The heat capacity of the degenerate electron gas is examined, and its relations with the key features of the spectrum are shown.

PACS: **71.20.-b** Electron density of states and band structure of crystalline solids;
75.70.Tj Spin-orbit effects.

Keywords: spin-orbit interaction, electron specific heat, two-dimensional systems, spintronics.