УДК 50 **Физико-математические науки**

Сулейманлы Б. Д., *аспирант,*

Национальный Исследовательский Ядерный Университет «МИФИ»,

Россия, г. Москва

ТЕРМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ КВАЗИДВУМЕРНЫХ СТРУКТУР В ПРИСУТСТВИИ КОМБИНИРОВАННОГО СПИН-ОРБИТАЛЬНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ РАШБЫ – ДРЕССЕЛЬХАУСА И ВНЕШНЕГО ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ

Аннотация: Получены точные аналитические решения уравнения Шредингера для электрона в асимметричной квазидвумерной структуре с комбинированным спин-орбитальным взаимодействием Рашбы-Дрессельхауса при наличии внешнего электрического поля и параболического потенциала конфайнмента. Методами статистической термодинамики представлены температурные зависимости основных термодинамических функций. Обнаружено аномальное поведение теплоемкости (аномалия Шоттки), связанное с расщеплением электронных уровней под действием спин-орбитальных взаимодействий Рашбы и Дрессельхауса.

Ключевые слова: комбинированное спин-орбитальное взаимодействие, аномалия Шоттки, квазидвумерная структура.

Annotation: The exact solutions of the Schrödinger equation are obtained for an electron in an asymmetric quasi-two-dimensional structure with a combined spin-orbit Rashba-Dresselhaus interaction in the presence of an external electric field and a parabolic confinement potential. The methods of statistical thermodynamics present the temperature dependences of the basic thermodynamic functions. An anomalous behavior of the specific heat (Schottky anomaly) was found, associated with the

splitting of electronic levels under the influence of spin-orbit interactions of Rashba and Dresselhaus.

Keywords: combined spin-orbit interaction, Schottky anomaly, quasi-two-dimensional structure.

ВВЕДЕНИЕ

В настоящее время полупроводниковая спинтроника является быстро развивающейся областью физики. Важную роль в этом направлении играет спин-орбитальное взаимодействие. Оно является многообещающим инструментом в реализации устройств спинового транспорта. Как известно, в асимметричных (в направлении своей нормали) квазидвумерных структурах (например, на основе полупроводниковых гетероструктур A_3B_5) существуют спин-орбитальное взаимодействие Рашбы, обусловленное структурной асимметрией, и спин-орбитальное взаимодействие Дрессельхауза, вызванное объемной инверсионной асимметрией [1, с. 146801]. Также в большом количестве квазидвумерных структур на основе полупроводников совершается комбинированное спин-орбитальное взаимодействие Рашбы и Дрессельхауса [2, с. 354].

Для целенаправленного применения вышеуказанных структур в технологии необходимо знать влияние спин-орбитальных взаимодействий Рашбы и Дрессельхауса на электронные состояния и термодинамические характеристики. К настоящему времени проведено несколько экспериментальных и теоретических исследований для достижения данной цели без учета роли комбинированного спин-орбитального взаимодействия Рашбы-Дрессельхауса в термодинамических свойствах квантовых структур [3, с. 104310]. В данной работе мы исследовали влияние комбинированного спин-орбитального взаимодействия Рашбы-Дрессельхауса при наличии внешнего электрического поля и параболического потенциала конфайнмента на электронные состояния и термодинамические характеристики квазидвумерных структур. Проанализированы зависимости основных термодинамических функций от температуры. Предсказан эффект возникновения аномалии Шоттки, связанное с расщеплением электронных уровней под действием спин-орбитальных взаимодействий Рашбы и Дрессельхауса.

ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассмотрим квазидвумерную структуру конечной толщины, расположенная в плоскости XOY. Электрическое поле, постоянное и однородное, направлено перпендикулярно структуре вдоль оси z. Полный гамильтониан этой задачи в приближении эффективной массы можно записать следующим образом

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m^*} + V(z) - e\varepsilon z + \frac{\alpha_R}{\hbar}(\sigma_x P_y - \sigma_y P_x) + \frac{\alpha_D}{\hbar}(\sigma_x P_x - \sigma_y P_y) \qquad (1)$$

где: $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ – оператор импульса; m^*– эффективная масса электрона; $V(z) = \dfrac{m^*\omega^2 z^2}{2}$ – параболический потенциал конфайнмента с постоянной частотой ω; e – заряд электрона; ε – напряженность электрического поля; α_R и α_D – параметры спин-орбитальных взаимодействий Рашбы (α_R) и Дрессельхауса (α_D); σ_i – матрицы Паули.

Уравнение Шредингера рассматриваемой задачи в координатном представлении имеет вид

$$i\hbar\frac{\partial\psi(x,y,z;t)}{\partial t} = H\psi(x,y,z;t) \qquad (2)$$

Найдем общий вид волновой функции φ_σ, соответствующей стационарному состоянию. Поскольку оператор H в уравнении (1) не зависит явно от времени, то волновую функцию следует искать в виде

$$\varphi_\sigma(x,y,z;t) = e^{i(k_x x + k_y y - Et/\hbar)}\varphi_\sigma(z) \qquad (3)$$

Такой вид $\varphi_\sigma(x,y,z;t)$ позволяет сводить уравнение (2) к достаточно компактной системе двух уравнений для $\varphi_\sigma(z)$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2}{dz^2}+\frac{\hbar^2k^2}{2m^*}+\frac{m^*\omega^2z^2}{2}-e\varepsilon z-E\right)\varphi_{\uparrow}(z)+(\alpha_R(k_y+ik_x)+\alpha_D(k_x+ik_y))\varphi_{\downarrow}(z)=0 \quad (4)$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2}{dz^2}+\frac{\hbar^2k^2}{2m^*}+\frac{m^*\omega^2z^2}{2}-e\varepsilon z-E\right)\varphi_{\downarrow}(z)+(\alpha_R(k_y-ik_x)+\alpha_D(k_x-ik_y))\varphi_{\uparrow}(z)=0 \quad (5)$$

где: $k=\sqrt{k_x^2+k_y^2}$ – модуль двумерного волнового вектора; E– полная энергия электрона.

В отсутствие спин-орбитальных взаимодействий уравнения (4) и (5) принимают вид

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m^*}\frac{d^2}{dz^2}+\frac{\hbar^2k^2}{2m^*}+\frac{m^*\omega^2}{2}(z-\frac{e\varepsilon}{m^*\omega^2})^2-\frac{e^2\varepsilon^2}{2m^*\omega^2}-E^{(0)}\right)\varphi^{(0)}(z)=0 \qquad (6)$$

Собственные функции и собственные значения последнего уравнения известно

$$\varphi_n^{(0)}(z)=\frac{\left(\frac{m^*\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{2^n n!}}e^{-\frac{\gamma^2}{2}}H_n(\gamma) \qquad (7)$$

$$E_n^{(0)}=\left(n+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega+\frac{\hbar^2k^2}{2m^*}-\frac{e^2\varepsilon^2}{2m^*\hbar\omega^3} \qquad (8)$$

где: $n=0,1,2,...$ – квантовое число, $\gamma=\sqrt{\frac{m^*\omega}{\hbar}}\left(z-\frac{e\varepsilon}{m^*\omega^2}\right)$; $H_n(\gamma)$ – полиномы Эрмита.

Зная решение (7), можно найти общие решения уравнений (4) и (5) в виде линейной комбинации $\varphi_n^{(0)}(z)$

$$\varphi_\sigma(z)=\sum_{n=0}^{\infty}a_n^\sigma\varphi_n^{(0)}(z) \qquad (9)$$

где коэффициенты $a_n^{\uparrow}$ и $a_n^{\downarrow}$ удовлетворяют условию нормализации $\sum_n(|a_n^{\uparrow}|^2+|a_n^{\downarrow}|^2)=1$. Подставляя волновые функции (9) в уравнении (4) и (5), получаем

$$\begin{pmatrix} E_n^{(0)} - E & \alpha_R(k_y + ik_x) + \alpha_D(k_x + ik_y) \\ \alpha_R(k_y - ik_x) + \alpha_D(k_x - ik_y) & E_n^{(0)} - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_n^{\uparrow} \\ a_n^{\downarrow} \end{pmatrix} = 0 \qquad (10)$$

Таким образом точное решение уравнения Шредингера с параболическим потенциалом конфайнмента в присутствии электрического поля и спин-орбитальных взаимодействий Рашбы и Дрессельхауса можно найти из условия обращения в нуль детерминанта системы уравнений (10)

$$E_n^{\sigma} = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - \frac{e^2\varepsilon^2}{2m^*\hbar\omega^3} \pm \sqrt{\left(\alpha_R k_x + \alpha_D k_y\right)^2 + \left(\alpha_R k_y + \alpha_D k_x\right)^2} \qquad (11)$$

ТЕРМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ

Для термодинамических расчетов мы фиксируем внешние условия квазидвумерной структуры, считая ее замкнутой системой, контактирующей с термостатом при температуре T. Чтобы получить термодинамические функции, нам нужно вычислить каноническую статистическую сумму, которая определяется выражением

$$Z = \sum_i e^{-\beta E_i} \qquad (12)$$

где i обозначает конкретное квантовое состояние (n, σ), а β является обратной величиной термодинамической температуры, и определяется как $\frac{1}{k_B T}$. Учитывая вклады взаимодействий Рашбы и Дрессельхауса, получаем следующее соотношение для статистической суммы

$$Z_\sigma = Z_\uparrow + Z_\downarrow = e^{-\beta\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - \frac{e^2\varepsilon^2}{2m^*\hbar\omega^3}\right)} \operatorname{csch}\left(\frac{\hbar\omega\beta}{2}\right) \cosh(\beta\Lambda) \qquad (13)$$

где:

$$\Lambda = \sqrt{\left(\alpha_R k_x + \alpha_D k_y\right)^2 + \left(\alpha_R k_y + \alpha_D k_x\right)^2}$$

$$Z_\uparrow = \sum_i e^{-\beta(\hbar\omega(i+1/2) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - \frac{e^2\varepsilon^2}{2m^*\hbar\omega^3} + \Lambda)}$$

$$Z_\downarrow = \sum_i e^{-\beta(\hbar\omega(i+1/2) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - \frac{e^2\varepsilon^2}{2m^*\hbar\omega^3} - \Lambda)}$$

На основе формулы (13) имеется возможность получить выражения для всех термодинамических функций, используя известные термодинамические соотношения:

$$\left\langle E_\sigma \right\rangle = -\frac{\partial \ln Z_\sigma}{\partial \beta} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - \frac{e^2\varepsilon^2}{2m^*\hbar\omega^3} - \Lambda \tanh(\beta\Lambda) + \frac{\hbar\omega}{2}\coth\left(\frac{\hbar\omega\beta}{2}\right) \qquad (14)$$

$$F_\sigma = -\frac{\ln Z_\sigma}{\beta} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} - \frac{e^2\varepsilon^2}{2m^*\hbar\omega^3} - \frac{\ln\left(\operatorname{csch}\left(\frac{\hbar\omega\beta}{2}\right)\cosh(\beta\Lambda)\right)}{\beta} \qquad (15)$$

$$C_V^\sigma = -k_B\beta^2 \frac{\partial\left\langle E_\sigma \right\rangle}{\partial \beta} = k_B\beta^2\left(\Lambda^2 \operatorname{sech}^2(\beta\Lambda) + \frac{1}{4}\hbar^2\omega^2 \operatorname{csch}^2\left(\frac{\hbar\omega\beta}{2}\right)\right) \qquad (16)$$

$$S_\sigma = k_B\beta\left(\left\langle E_\sigma \right\rangle - F_\sigma\right) =$$

$$= k_B\left(\ln\left(\operatorname{csch}\left(\frac{\hbar\omega\beta}{2}\right)\cosh(\beta\Lambda)\right) - \beta\left(\Lambda\tanh(\beta\Lambda) - \frac{\hbar\omega}{2}\coth\left(\frac{\hbar\omega\beta}{2}\right)\right)\right) \qquad (17)$$

Здесь $\left\langle E_\sigma \right\rangle$ – внутренняя энергия, F_σ – свободная энергия Гельмгольца, C_V^σ – теплоемкость, S_σ – энтропия данной структуры. Из полученных выражений для внутренней энергии (14) и свободной энергии Гельмгольца (15) видно, что при фиксированной температуре они зависят от внешнего электрического поля и параметра спин-орбитальных взаимодействий Рашбы и Дрессельхауса. Однако тепловые свойства теплоемкость и энтропия не зависят от ε, но очень чувствительны к изменению параметров α_R и α_D.

АНОМАЛИЯ ШОТТКИ

Чтобы продемонстрировать особенности тепловых свойств изучаемой нами квазидвумерной системы на рис. 1 мы показали теплоемкость как функцию температуры в безразмерных единицах $\tilde{C}_V = \frac{C_V^\sigma}{k_B}, \tilde{T} = \frac{k_B T}{\hbar\omega}$.

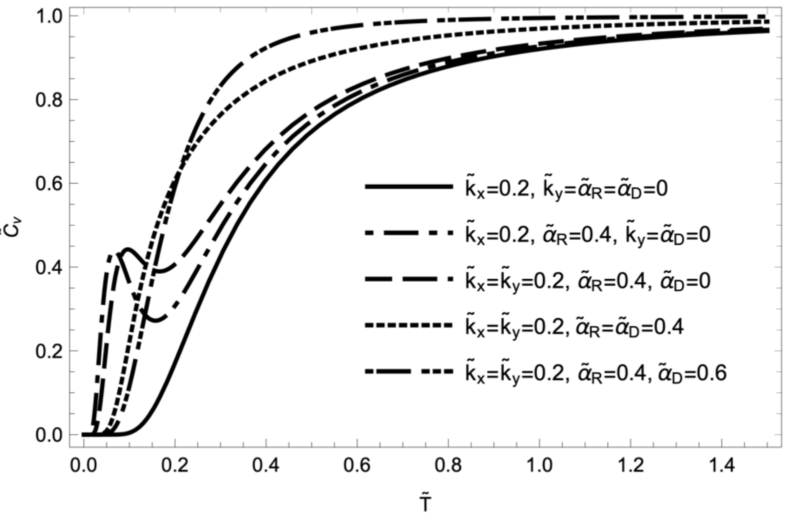

Рисунок 1. Зависимость теплоемкости от температуры

Эта зависимость показывает, что при отсутствии спин-орбитальных взаимодействий Рашбы и Дрессельхауса в структуре аномальное поведение теплоемкости, как правило, не возникает, и теплоемкость увеличивается с ростом температуры. Такая тенденция сохранится и для $\tilde{\alpha}_{R,D} \geq 0.9$. Однако при определенных значениях $\tilde{\alpha}_{R,D}\left(0 < \tilde{\alpha}_R + \tilde{\alpha}_D < 0.9\right)$, когда температура увеличивается от абсолютного нуля, $\tilde{C}_V$ внезапно начинает расти, а затем уменьшается, образуя пиковую структуру. Наблюдаемая структура пика является хорошо известной аномалией Шоттки, характерной для системы, в которой только два состояния имеют значение при низкой температуре, поскольку тепловой энергии, получаемой электронами, достаточно только для двух самых низких уровней. При этом уменьшение теплоемкости после пика до более низкого значения показывает, что в данной области электрону требуется меньшее количество тепла для возбуждения до следующего более высокого уровня. А при дальнейшем увеличении температуры теплоемкость снова начинает расти и приближается к значению $\tilde{C}_V = 1$. Это устойчивое увеличение $\tilde{C}_V$ с температурой связано с увеличением тепловой энергии электронов $k_B T$, что делает все больше и больше состояний доступными для тепловых возбуждений.

Таким образом, данная работа демонстрирует использование соответствующих аналитических решений уравнения Шредингера в присутствии спин-орбитальных взаимодействий Рашбы и Дрессельхауса и внешнего электрического поля для построения термодинамической теории квантовых квазидвумерных структур.

Библиографический список:

1. Srinivasan A. [и др.]. Detection and Control of Spin-Orbit Interactions in a GaAs Hole Quantum Point Contact // Physical Review Letters. 2017. № 14 (118). p. 146801.
2. Zutic I., Fabian J., Sarma S. Das Spintronics: Fundamentals and applications // Reviews of Modern Physics. 2004. № 2 (76). pp. 323–410.
3. Wojcik P. [и др.]. Spin transistor operation driven by the Rashba spin-orbit coupling in the gated nanowire // Journal of Applied Physics. 2014. № 10 (115). p. 104310.