

©1995 г.

ВЛИЯНИЕ КВАНТУЮЩЕГО МАГНИТНОГО ПОЛЯ НА ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР ЭЛЕКТРОНОВ В КВАЗИДВУМЕРНЫХ СЛОЯХ МНОГОДОЛИННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ

О.В.Кубис

Новосибирский государственный технический университет,
630092, Новосибирск, Россия
(Получена 20 июня 1994 г. Принята к печати 6 июля 1994 г.)

Показано, что взаимодействие квазидвумерного электронного газа с кристаллической решеткой в многодолинных полупроводниках при наличии квантующего магнитного поля приводит к появлению спонтанной деформации кристалла, снимающей многодолинное вырождение. Получены выражения для деформации кристалла и долинного расщепления, а также исследована температурная зависимость эффекта.

К числу давних проблем теории двумерных электронных систем относится проблема долинного вырождения в инверсионных слоях на поверхностях кремния (110)-Si и (111)-Si [1]. Эта проблема возникла после первых же исследований эффекта Шубникова-де Гааза в двумерном электронном газе, где было получено значение фактора долинного вырождения $g_v = 2$, тогда как теория предсказывала значения $g_v = 4$ для (110)-Si и $g_v = 6$ для (111)-Si. Для объяснения полученного парадокса в работе [2] была предложена модель, согласно которой взаимодействие двумерного газа электронов с кристаллической решеткой при наличии квантующего магнитного поля может приводить к появлению спонтанной деформации кристалла, снимающей многодолинное вырождение, что по сути является твердотельным аналогом эффекта Яна-Теллера в многоатомных молекулах. Возможность появления такого эффекта в трехмерных кристаллах многодолинных полупроводников обсуждались ранее в [3], однако проведенный анализ [3] показал, что для трехмерных кристаллов известных полупроводниковых материалов критерии возникновения спонтанной деформации чрезвычайно трудновыполнимы. Как будет видно из дальнейшего, при наличии квазидвумерного характера движения электронов условия возникновения рассматриваемого эффекта сравнительно легко могут быть реализованы для обычного многодолинного полупроводника. Цель данной работы — получение общих соотношений, описывающих рассматриваемый

эффект в произвольной квазидвумерной системе, а также проведение подробного анализа эффекта для поверхностей (110)-Si и (111)-Si, к которым относится основной объем накопленных экспериментальных данных.

1. Основные уравнения

Введем прямоугольную систему координат $\{x_1, x_2, x_3\}$, где ось x_1 направлена по нормали к поверхности, и будем рассматривать кристалл как полубесконечный изотропный упругий континуум, ограниченный плоскостью $x_1 = 0$. Вследствие плоской симметрии системы компоненты тензора деформации u_{ij} , возникающей благодаря электрон-решеточному взаимодействию, зависят только от координаты нормали x_1 , и потенциал электрон-решеточного взаимодействия имеет вид

$$U^{(\alpha)}(x_1) = \Xi_{ij}^{(\alpha)} u_{ij}(x_1). \quad (1.1)$$

Здесь $\Xi_{ij}^{(\alpha)}$ — тензор деформационного потенциала α -долины, а индекс α обозначает долины зоны проводимости, лежащие на различных осях в трехмерной зоне Бриллюэна. Как будет видно из дальнейшего, сдвиг тримерной энергии электрона за счет электрон-решеточного взаимодействия значительно меньше, чем расстояние между подзонами размерного квантования. Поэтому потенциал (1.1) можно рассматривать как возмущение и зависимость энергетических состояний α -долины от деформации определяется функционалом

$$\varepsilon_\alpha = \int |\Psi(x_1)|^2 \Xi_{ij}^{(\alpha)} u_{ij}(x_1) dx_1, \quad (1.2)$$

где $\Psi(x_1)$ — волновая функция электрона в квазидвумерном приповерхностном слое. При фиксированных температуре T и поверхностной концентрации электронов n_s состояние термодинамического равновесия системы электронной газ+решетка соответствует минимуму свободной энергии

$$\mathcal{F} = \mathcal{F}_e + \mathcal{F}_c, \quad (1.3)$$

где

$$\mathcal{F}_c = \frac{E}{2(1+\delta)} \int \left[u_{ij}^2(x_1) + \frac{\sigma}{1-2\sigma} u_{ii}^2(x_1) \right] dx_1 \quad (1.4)$$

есть поверхностная плотность упругой энергии кристалла (E — модуль Юнга, σ — коэффициент Пуассона), а

$$\mathcal{F}_e = \mu n_s + K_B T \sum_k \ln(1 - f_k) \quad (1.5)$$

есть поверхностная плотность свободной энергии электронного газа. Здесь μ — энергия Ферми, $f_k = \left[1 + \exp\left(\frac{\varepsilon_k - \mu}{K_B T}\right) \right]^{-1}$ — функция распределения Ферми-Дирака. Суммирование ведется по электронным состояниям k подзон проводимости, а зависимость энергии различных долин от деформации определяется функционалом (1.2).

Исследуем экстремали функционала (1.3). Варьируя (1.5), получим

$$\delta\mathcal{F}_e = \sum_k f_k \delta\varepsilon_k = \sum_\alpha n_\alpha \delta\varepsilon_\alpha, \quad (1.6)$$

где n_α — поверхностная концентрация электронов в α -долине. Тогда вариацию свободной энергии (1.3) можно записать в виде

$$\delta\mathcal{F} = \delta\mathcal{F}_e + \delta\mathcal{F}_c = \int \sigma_{ij} \delta u_{ij} dx_1, \quad (1.7)$$

где $\sigma_{ij} = \sigma_{ij}^{(c)} + \sigma_{ij}^{(e)}$, а $\sigma_{ij}^{(c)} = \frac{E}{1+\delta} \left(u_{ij} + \frac{\sigma}{1-2\sigma} u_{11} \delta_{ij} \right)$, $\sigma_{ij}^{(e)} = \sum_\alpha n_\alpha \Xi_{ij}^{(\alpha)} |\Psi(x_1)|^2$.

Согласно общему термодинамическому определению, σ_{ij} в (1.7) является тензором механических напряжений электрон-решеточной системы. Здесь $\sigma_{ij}^{(c)}$ — обычное выражение для тензора механических напряжений изотропной среды, а $\sigma_{ij}^{(e)}$ представляет собой добавку к тензору, обусловленную наличием электронного газа на поверхности. Интегрируя (1.7) по частям и учитывая, что $u_{ij} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right)$ (\mathbf{u} — вектор деформации), получим

$$\delta\mathcal{F} = \sigma_{i1} \delta u_i |_{x_1=0} - \int \frac{\partial \sigma_{i1}}{\partial x_1} \delta u_i dx_1.$$

Из условия экстремума $\delta\mathcal{F} = 0$ получаем систему уравнений

$$\frac{\partial \sigma_{i1}}{\partial x_1} = 0 \quad (1.8)$$

с граничными условиями

$$\sigma_{i1} \Big|_{x_1=0} = 0. \quad (1.9)$$

Система (1.8) представляет собой обычную систему уравнений упругости, которая совместно с граничными условиями (1.9) определяет деформацию u_{ij} , возникающую в кристалле благодаря электрон-решеточному взаимодействию. Уравнения (1.8) можно записать в виде

$$f_i^{(c)} + f_i^{(e)} = 0,$$

где $f_i^{(c)} = \frac{\partial \sigma_{i1}^{(c)}}{\partial x_1}$ — компоненты упругой силы, а $f_i^{(e)} = \frac{\partial \sigma_{i1}^{(e)}}{\partial x_1}$ — компоненты силы, действующей на кристалл со стороны электронного газа. Прежде чем решать систему (1.8)–(1.9), выясним, какой вид имеет сила $f^{(e)}$. Аппроксимируя $\Psi(x_1)$ волновой функцией электрона в приповерхностном инверсионном канале [1]

$$\Psi(x_1) = \left(\frac{b^3}{2} \right)^{1/2} x_1 \exp(-bx_1/2), \quad b = \text{const},$$

получим

$$f_i^{(e)}(x_1) = \frac{b^3}{2} x_1 \exp(-bx_1)(2 - bx_1) \sum_{\alpha} n_{\alpha} \Xi_{i1}^{(\alpha)}.$$

Отсюда видно, что силу, действующую со стороны электронов на кристалл, нельзя считать приложенной к поверхности кристалла: на поверхности ($x_1 = 0$) сила $f^{(e)} = 0$, а по мере удаления от поверхности меняются не только величина, но и направление силы (в областях $x_1 < 2/b$ и $x_1 > 2/b$ сила $f^{(e)}$ направлена в противоположные стороны). Как и следовало ожидать, полная сила, действующая со стороны электронов на кристалл, равна нулю:

$$\int f_i^{(e)} dx_1 = \sum_{\alpha} n_{\alpha} \Xi_{i1}^{(\alpha)} \int_0^{\infty} \frac{d|\Psi(x_1)|^2}{dx_1} dx_1 = 0.$$

Решением системы (1.8)-(1.9) является вектор деформации $\mathbf{u} = \{u_1, u_2, u_3\}$ с компонентами

$$\begin{aligned} u_1(x_1) &= - \left(\sum_{\alpha} n_{\alpha} \Xi_{11}^{(\alpha)} / \rho v_1^2 \right) \int_{\infty}^{x_1} |\Psi(x'_1)|^2 dx'_1, \\ u_2(x_1) &= - \left(\sum_{\alpha} n_{\alpha} \Xi_{21}^{(\alpha)} / \rho v_2^2 \right) \int_{\infty}^{x_1} |\Psi(x'_1)|^2 dx'_1, \\ u_3(x_1) &= - \left(\sum_{\alpha} n_{\alpha} \Xi_{31}^{(\alpha)} / \rho v_3^2 \right) \int_{\infty}^{x_1} |\Psi(x'_1)|^2 dx'_1, \end{aligned} \quad (1.10)$$

где

$$v_l = \left[\frac{E(1-\sigma)}{\rho(1+\sigma)(1-2\sigma)} \right]^{1/2}, \quad v_t = \left[\frac{E}{2\rho(1+\sigma)} \right]^{1/2}$$

есть продольная и поперечная скорости звука в изотропной упругой среде, ρ — плотность среды. Соответственно компоненты тензора деформации равны

$$\begin{aligned} u_{11}(x_1) &= -\frac{1}{\rho v_1^2} |\Psi(x_1)|^2 \sum_{\alpha} n_{\alpha} \Xi_{11}^{(\alpha)}, \\ u_{21}(x_1) &= u_{12}(x_1) = -\frac{1}{2\rho v_2^2} |\Psi(x_1)|^2 \sum_{\alpha} n_{\alpha} \Xi_{21}^{(\alpha)}, \\ u_{31}(x_1) &= u_{13}(x_1) = -\frac{1}{2\rho v_3^2} |\Psi(x_1)|^2 \sum_{\alpha} n_{\alpha} \Xi_{31}^{(\alpha)}, \\ u_{23} &= u_{32} = u_{22} = u_{33} = 0. \end{aligned} \quad (1.11)$$

Для того, чтобы определить, какая деформация соответствует минимуму, а какая максимуму функционала (1.3), необходимо исследовать вторую вариацию $\delta^2 \mathcal{F} = \delta^2 \mathcal{F}_e + \delta^2 \mathcal{F}_c$ на экстремалях (1.11). Варьируя (1.4) по компонентам вектора деформации и принимая во внимание соотношения (1.11), получим

$$\delta^2 \mathcal{F}_c = J \left[\frac{1}{\rho v_t^2} \left(\sum_{\alpha} \Xi_{11}^{(\alpha)} \delta n_{\alpha} \right)^2 + \frac{1}{\rho v_t^2} \left(\sum_{\alpha} \Xi_{21}^{(\alpha)} \delta n_{\alpha} \right)^2 + \frac{1}{\rho v_t^2} \left(\sum_{\alpha} \Xi_{31}^{(\alpha)} \delta n_{\alpha} \right)^2 \right], \quad (1.12)$$

где $J = \int_0^{\infty} |\Psi(x_1)|^4 dx_1$. Варьируя \mathcal{F}_e , получаем

$$\delta \mathcal{F}_e = \sum_k \frac{\partial f_k}{\partial \varepsilon_k} (\delta \varepsilon_k - \delta \mu) \delta \varepsilon_k, \quad (1.13)$$

где вариацию энергии Ферми $\delta \mu$ можно определить из условия постоянства поверхностной концентрации электронов $n_s = \sum_k f_k$:

$$\delta n_s = \sum_k \frac{\partial f_k}{\partial \varepsilon_k} (\delta \varepsilon_k - \delta \mu) = 0.$$

С учетом (1.11) выражение (1.2) для ε_{α} имеет вид

$$\varepsilon_{\alpha} = -J \left[\frac{1}{\rho v_t^2} \Xi_{11}^{(\alpha)} \sum_{\beta} n_{\beta} \Xi_{11}^{(\beta)} + \frac{1}{\rho v_t^2} \Xi_{21}^{(\alpha)} \sum_{\beta} n_{\beta} \Xi_{21}^{(\beta)} + \frac{1}{\rho v_t^2} \Xi_{31}^{(\alpha)} \sum_{\beta} n_{\beta} \Xi_{31}^{(\beta)} \right]. \quad (1.14)$$

Все полученные в данном параграфе выражения носят достаточно общий характер и справедливы для любого многодолинного полупроводника. Для более детального анализа необходимо конкретизировать задачу. В дальнейшем мы будем рассматривать взаимодействие электронов с решеткой на высокосимметричных поверхностях кремния (110)-Si и (111)-Si.

2. Фазовый переход на поверхности кремния (110)-Si .

Будем рассматривать электронный газ в квазидвумерном слое на (110)-Si в квантовом пределе, когда электроны заполняют только первые подзоны размерного квантования четырех эквивалентных долин (двух X-долин и двух Y-долин). Направим базисные векторы системы координат $\{x_1, x_2, x_3\}$ по следующим кристаллографическим осям:

$$\mathbf{x}_1 \parallel [110], \quad \mathbf{x}_2 \parallel [1\bar{1}0], \quad \mathbf{x}_3 \parallel [001]. \quad (2.1)$$

Для дальнейшего анализа необходимо знать явный вид тензора деформационного потенциала в этом базисе. Для α -долины кремния тензор деформационного потенциала определяется выражением

$$\Xi_{ij}^{(\alpha)} = \Xi_{\alpha} \delta_{ij} + \Xi_u k_i^{(\alpha)} k_j^{(\alpha)}, \quad (2.2)$$

где Ξ_α, Ξ_u — константы деформационного потенциала зоны проводимости кремния, $\mathbf{k}^{(\alpha)}$ — единичный вектор k -пространства в направлении α -долины (под α -долиной здесь подразумевается один из минимумов зоны проводимости кремния, лежащий на оси $\alpha = x, y, z$ в трехмерном k -пространстве). Записав (2.2) в базисе (2.1), получим из (1.11)

$$\begin{aligned} u_{11}(x_1) &= -\frac{1}{\rho v_l^2} |\Psi(x_1)|^2 \left(\Xi_d + \frac{1}{2} \Xi_u \right) n_s, \\ u_{12}(x_1) &= u_{21}(x_1) = -\frac{1}{\rho v_l^2} |\Psi(x_1)|^2 \Xi_u n_{xy}, \\ u_{13} &= u_{31} = u_{23} = u_{32} = u_{22} = u_{33} = 0, \end{aligned} \quad (2.3)$$

где $n_{\alpha\beta} = n_\alpha - n_\beta$ — разность концентраций электронов в α - и β -долинах. С учетом (2.2) и (2.3) зависимость энергии долин (1.2) от деформации имеет вид

$$\begin{aligned} \varepsilon_x &= \left(\Xi_\alpha + \frac{1}{2} \Xi_u \right) \int |\Psi(x_1)|^2 u_{11}(x_1) dx_1 + \Xi_u \int |\Psi(x_1)|^2 u_{12}(x_1) dx_1, \\ \varepsilon_y &= \left(\Xi_d + \frac{1}{2} \Xi_u \right) \int |\Psi(x_1)|^2 u_{11}(x_1) dx_1 - \Xi_u \int |\Psi(x_1)|^2 u_{12}(x_1) dx_1. \end{aligned}$$

Соответственно энергия долин (1.14)

$$\begin{aligned} \varepsilon_x &= -J \left[\frac{1}{\rho v_l^2} \left(\Xi_d + \frac{1}{2} \Xi_u \right)^2 n_s + \frac{1}{2\rho v_l^2} \Xi_u^2 n_{xy} \right], \\ \varepsilon_y &= -J \left[\frac{1}{\rho v_l^2} \left(\Xi_d + \frac{1}{2} \Xi_u \right)^2 n_s - \frac{1}{2\rho v_l^2} \Xi_u^2 n_{xy} \right]. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Из (1.2), (2.3), (2.4) следует, что деформация u_{11} , соответствующая сжатию вдоль оси квантования x_1 , понижает энергию X - и Y -долин на одну и ту же величину $J(\Xi_d + \frac{1}{2}\Xi_u)^2 n_s / \rho v_l^2$ и поэтому не приводит к снятию многодолинного вырождения. Долинное же расщепление

$$\Delta_{xy} = \varepsilon_x - \varepsilon_y = 2 \int |\Psi(x_1)|^2 \Xi_u u_{12}(x_1) dx_1 = -\frac{J}{\rho v_l^2} \Xi_u^2 n_{xy}, \quad (2.5)$$

т.е. ответственной за снятие многодолинного вырождения является компонента тензора деформации u_{12} , соответствующая сдвигу в плоскости (110). Отметим, что уравнение для u_{12} (2.3) является функциональным, поскольку n_{xy} зависит от величины долинного расщепления Δ_{xy} и, следовательно, является функционалом относительно сдвиговой деформации u_{12} : $n_{xy} = n_{xy}[u_{12}(x_1)]$. Нетрудно убедиться в том, что деформация $u_{12} = 0$ удовлетворяет этому функциональному уравнению, поскольку при $u_{12} = 0$ соответствует долинное расщепление и эквивалентные долины X и Y одинаково заполнены электронным газом, т.е.

$n_{xy} = 0$. Дальнейший анализ сводится к исследованию второй вариации $\delta^2 \mathcal{F}$ на этой экстремали.

Учитывая постоянство концентрации электронов n_s , получим из (2.4)

$$\delta \varepsilon_x = -\delta \varepsilon_y = -J \Xi_u^2 \delta n_{xy} / 2\rho v_t^2.$$

Вследствие эквивалентности X- и Y-долин при $u_{12} = 0$ производная $\partial f_k / \partial \varepsilon_k$ на данной экстремали принимает одинаковые значения для всех четырех долин, т.е. $\sum_{k_x} \frac{\partial f_k}{\partial \varepsilon_k} = \sum_{k_y} \frac{\partial f_k}{\partial \varepsilon_k}$. Отсюда следует, что

$$\begin{aligned} \delta \mu &= \left[\sum_{k_x} \frac{\partial f_k}{\partial \varepsilon_k} \delta \varepsilon_x + \sum_{k_y} \frac{\partial f_k}{\partial \varepsilon_k} \delta \varepsilon_y \right] / \sum_k \frac{\partial f_k}{\partial \varepsilon_k} = \\ &= -\frac{J}{2\rho v_t^2} \Xi_u^2 \delta n_{xy} \left[\sum_{k_x} \frac{\partial f_k}{\partial \varepsilon_k} - \sum_{k_y} \frac{\partial f_k}{\partial \varepsilon_k} \right] / \sum_k \frac{\partial f_k}{\partial \varepsilon_k} = 0, \end{aligned}$$

где знак k_α у суммы означает суммирование по электронным состояниям α -долины. Соответственно из (1.13) получаем

$$\delta^2 \mathcal{F}_e = \sum_k \frac{\partial f_k}{\partial \varepsilon_k} (\delta \varepsilon_k)^2 = \left(\frac{J \Xi_u^2}{\rho v_t^2} \right)^2 (\delta n_{xy})^2 \sum_{k'} \frac{\partial f_k}{\partial \varepsilon_k},$$

где суммирование ведется по электронным состояниям k' одной из четырех вырожденных долин при $u_{12} = 0$. Подставляя тензор (2.2), записанный в базисе (2.1), в (1.12), получим

$$\delta^2 \mathcal{F}_c = \frac{J}{\rho v_t^2} \Xi_u^2 (\delta n_{xy})^2.$$

Таким образом, на рассматриваемой экстремали $u_{12} = 0$ вторая вариация

$$\delta^2 \mathcal{F} = J \left(\frac{\Xi_u}{\rho v_t^2} \right)^2 \left(\rho v_t^2 + J \Xi_u^2 \sum_{k'} \frac{\partial f_k}{\partial \varepsilon_k} \right) (\delta n_{xy})^2. \quad (2.6)$$

Если $\delta^2 \mathcal{F} > 0$, то недеформированное состояние кристалла соответствует минимуму свободной энергии \mathcal{F} . Если же $\delta^2 \mathcal{F} < 0$, то $u_{12} = 0$ соответствует максимуму \mathcal{F} , в связи с чем минимум \mathcal{F} реализуется при деформации $u_{12} \neq 0$, удовлетворяющей соотношению (2.3). Таким образом, в приповерхностном слое кристалла возможен фазовый переход второго рода: в кубической фазе ($\delta^2 \mathcal{F} > 0$) $u_{12} = 0$, а в тетрагональной фазе ($\delta^2 \mathcal{F} < 0$) $u_{12} \neq 0$. Выигрыш энергии \mathcal{F} при возникновении деформации обусловлен уменьшением \mathcal{F}_e благодаря перетеканию электронов из поднимающихся долин в опускающиеся. Поэтому фазовый переход становится энергетически выгодным ($\delta^2 \mathcal{F} < 0$), если в опускающиеся долины перетекает достаточно большое число электронов из поднимающихся долин, благодаря чему увеличение \mathcal{F}_c при

деформации решетки компенсируется уменьшением \mathcal{F}_e . Согласно (2.6) критерий фазового перехода имеет вид

$$A > 1, \quad (2.7)$$

$$A = -J\Xi_u^2 \sum_{k'} \frac{\partial f_k}{\partial \varepsilon_k} / \rho v_t^2. \quad (2.8)$$

Для выполнения условия (2.7) необходимо, чтобы плотность электронных состояний была достаточно большой вблизи уровня Ферми, а температура T была маленькой, что соответствует большим отрицательным значениям величины $\sum_{k'} \partial f_k / \partial \varepsilon_k$. При $T = 0$ $\partial f_k / \partial \varepsilon_k$ имеет особенность δ -функции: $\frac{\partial f_k}{\partial \varepsilon_k} = -\delta(\varepsilon_k - \mu)$ и $\sum_{k'} \frac{\partial f_k}{\partial \varepsilon_k} = -N_\mu$, где N_μ — плотность состояний на уровне Ферми в одной из четырех долин. Для квазидвумерных электронов имеет место соотношение [1] $N_\mu = 2m^*/\pi\hbar^2$, где эффективная масса электронов для (110)-Si $m^* = 0.324m_0$. Нетрудно убедиться в том, что в этом случае критерий (2.7) не выполняется и многодолинное вырождение устойчиво. Реально условие (2.7) выполняется в квантующих магнитных полях \mathbf{B} при низких температурах, так как плотность состояний в двумерном электронном газе N_μ при наличии квантующего магнитного поля имеет особенность δ -функции [1].

Рассмотрим устойчивость электрон-решеточной системы при $T = 0$ и $\mathbf{B} \parallel [110]$, аппроксимируя плотность состояний на уровне Ландау δ -функцией. Пусть концентрации электронов в приповерхностном слое такова, что $n_s/n_l = 2(2m + 1)$, где $n_l = eB/h$ — концентрация электронов на полностью заполненном уровне Ландау [1], а $m = 0, 1, 2, 3, \dots$. Если $u_{12} = 0$, то уровень Ферми проходит через вырожденные уровни Ландау X - и Y -долин. При этом выполняется критерий (2.7) и состояние, соответствующее недеформированному кристаллу, неустойчиво относительно перехода в состояние со сдвиговой деформацией

$$u_{12}(x_1) = \pm \frac{1}{2\rho v_t^2} \Xi_u n_l |\Psi(x_1)|^2. \quad (2.9)$$

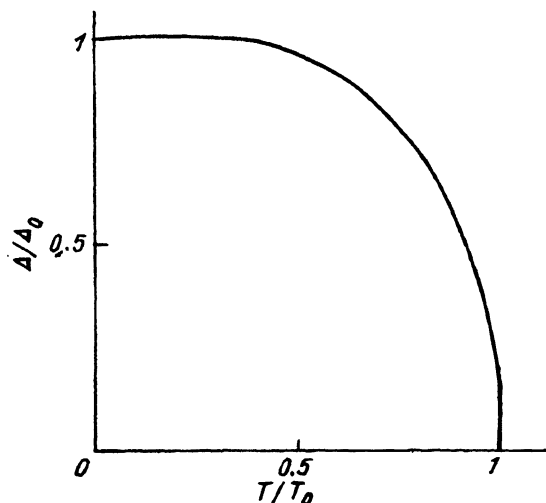
Знак $+$ соответствует сдвиговой деформации, при которой X -долины поднимаются и Y -долины опускаются. При знаке $-$, наоборот, поднимаются Y -долины, а X -долины опускаются. чистый выигрыш энергии системы при таком долинном расщеплении

$$\Delta\mathcal{F} = J\Xi_u^2 n_l^2 / 2\rho v_t^2,$$

а величина долинного расщепления

$$\Delta_0 = J\Xi_u^2 n_l / \rho v_t^2. \quad (2.10)$$

Пусть концентрация электронов такова, что $n_s/n_l = 4m$. В этом случае при $u_{12} = 0$ X - и Y -долины заполнены одинаково и уровень Ферми проходит между уровнями Ландау, т.е. $N_\mu = 0$ и критерий (2.7) не



Зависимость амплитуды долинного расщепления Δ от температуры T .

выполняется. В связи с этим $\mathcal{F}(u_{12})$ имеет минимум при $u_{12} = 0$ и многодолинное вырождение устойчиво. Таким образом, при изменении магнитного поля величина долинного расщепления будет осциллировать с амплитудой Δ_0 и с периодом по обратной магнитной индукции $1/B$, равны $4e/n_s h$. Проведенные согласно (2.10) оценки показывают, что при характерных для исследовавшихся инверсионных каналов [1] концентрациях $n_s \sim 10^{12} \text{ см}^{-2}$ и $B \sim 10 \text{ Т}$ амплитуда долинного расщепления $\Delta_0 \sim 10^{-4} \text{ эВ}$.

Исследуем теперь температурную зависимость долинного расщепления. Учитывая дискретность уровней Ландау, получим

$$\sum_{k'} \frac{\partial f_k}{\partial \varepsilon_k} = n_l \int \delta(\varepsilon - \mu) \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} d\varepsilon = -n_l / 4KB_T.$$

Тогда из (2.7), (2.8) и (2.10) следует, что температура фазового перехода определяется выражением

$$T_0 = \Delta_0 / 4KB_T. \quad (2.11)$$

Для того чтобы найти температурную зависимость долинного расщепления, необходимо решить уравнение (2.5). Результат численного решения этого уравнения приведена на рисунке. Из этого графика видно, что амплитуда долинного расщепления уменьшается при увеличении температуры и обращается в нуль при $T \geq T_0$. Таким образом, более симметричной фазе недеформированного кристалла соответствуют более высокие температуры, а менее симметричной фазе деформированного кристалла — низкие температуры, что является характерной особенностью большинства фазовых переходов второго рода.

До настоящего момента мы рассматривали кристалл как изотропный упругий континуум. Однако точно такой же анализ можно провести с учетом анизотропии упругих свойств кристалла, если вместо стоящего под интегралом в (1.4) выражения для упругой энергии изотропной среды использовать известное выражение для упругой энергии кубического кристалла. Повторяя весь анализ с учетом анизотропии кристалла, придем к выводу, что все ранее полученные выражения

сохраняют свою силу и при учете анизотропии упругих свойств, если вместо скоростей звука в изотропной среде v_l и v_t использовать выражения для скоростей продольной и поперечной акустической волн, распространяющихся вдоль оси квантования [110]:

$$v_l = [(c_{11} + c_{12} + 2c_{44})/2\rho]^{1/2}, \quad v_t = [(c_{11} - c_{12})/2\rho]^{1/2},$$

где c_{11} , c_{12} и c_{44} — модули упругости кубического кристалла.

3. Фазовый переход на поверхности кремния (111)–Si

Анализ деформационного фазового перехода на поверхности (111)–Si идейно полностью аналогичен анализу, проведенному в предыдущем разделе статьи для (110)–Si.

Будем рассматривать электронный газ в квазидвумерном слое на (111)–Si в квантовом пределе, когда электроны заполняют первые подзоны шести эквивалентных долин (двух X-долин, двух Y-долин, двух Z-долин). Направим базисные векторы системы координат $\{x_1, x_2, x_3\}$ по следующим кристаллографическим осям:

$$\mathbf{x}_1 \parallel [111], \quad \mathbf{x}_2 \parallel [1\bar{1}0], \quad \mathbf{x}_3 \parallel [1\bar{1}2]. \quad (3.1)$$

Записав тензор деформационного потенциала (2.2) в базисе (3.1), получим из (1.11)

$$\begin{aligned} u_{11}(x_1) &= -\frac{1}{\rho v_t^2} |\Psi(x_1)|^2 \left(\Xi_d + \frac{1}{3} \Xi_u \right) n_x, \\ u_{12}(x_1) &= -\frac{1}{\sqrt{6} \rho v_t^2} |\Psi(x_1)|^2 \Xi_u n_{xy}, \\ u_{13}(x_1) &= -\frac{1}{3\sqrt{2} \rho v_t^2} |\Psi(x_1)|^2 \Xi_u (n_{zx} + n_{zy}), \\ u_{23} &= u_{32} = u_{22} = u_{33} = 0. \end{aligned} \quad (3.2)$$

Соответственно энергии долин (1.2)

$$\begin{aligned} \varepsilon_x &= \left(\Xi_d + \frac{1}{3} \Xi_u \right) \int |\Psi(x_1)|^2 u_{11}(x_1) dx_1 + \frac{2}{\sqrt{6}} \Xi_u \int |\Psi(x_1)|^2 u_{12}(x_1) dx_1 - \\ &\quad - \frac{\sqrt{2}}{3} \Xi_u \int |\Psi(x_1)|^2 u_{13}(x_1) dx_1, \\ \varepsilon_y &= \left(\Xi_d + \frac{1}{3} \Xi_u \right) \int |\Psi(x_1)|^2 u_{11}(x_1) dx_1 - \frac{2}{\sqrt{6}} \Xi_u \int |\Psi(x_1)|^2 u_{12}(x_1) dx_1 - \\ &\quad - \frac{\sqrt{2}}{3} \Xi_u \int |\Psi(x_1)|^2 u_{13}(x_1) dx_1, \\ \varepsilon_z &= \left(\Xi_d + \frac{1}{3} \Xi_u \right) \int |\Psi(x_1)|^2 u_{11}(x_1) dx_1 + \frac{2\sqrt{2}}{3} \Xi_u \int |\Psi(x_1)|^2 u_{13}(x_1) dx_1. \end{aligned}$$

Отсюда долинное расщепление

$$\begin{aligned}\Delta_{xy} &= \varepsilon_x - \varepsilon_y = -2J\Xi_u^2 n_{xy}/3\rho v_t^2, \\ \Delta_{xz} &= \varepsilon_x - \varepsilon_z = J\Xi_u^2 (n_{zx} + n_{zy} - n_{xy})/3\rho v_t^2, \\ \Delta_{yz} &= \varepsilon_y - \varepsilon_z = J\Xi_u^2 (n_{zx} + n_{zy} + n_{xy})/3\rho v_t^2.\end{aligned}\quad (3.4)$$

Из (3.3) следует, что ответственными за снятие долинного вырождения являются деформации u_{12} и u_{13} , соответствующие сдвигу в плоскости (111). Нетрудно убедиться в том, что деформация $u_{12} = u_{13} = 0$ удовлетворяет функциональным уравнениям (3.4) и, следовательно, реализует экстремаль функционала (1.3). Вторая вариация свободной энергии системы на этой экстремали имеет вид

$$\delta^2 \mathcal{F} = \frac{2J}{9} \left(\frac{\Xi_u}{\rho v_t^2} \right)^2 \left(3\rho v_t^2 + 2J\Xi_u^2 \sum_{k'} \frac{\partial f_k}{\partial \varepsilon_k} \right) \left[(\delta n_{xy})^2 + \frac{1}{3} (\delta n_{zx} + \delta n_{zy})^2 \right], \quad (3.5)$$

где суммирование ведется по электронным состояниям k' одной из шести вырожденных подзон при $u_{12} = u_{13} = 0$. Из (3.5) следует критерий деформационного фазового перехода

$$A > 1, \quad (3.6)$$

где

$$A = -2J\Xi_u^2 \sum_{k'} \frac{\partial f_k}{\partial \varepsilon_k} / 3\rho v_t^2. \quad (3.7)$$

Так же как и для (110)-Si, критерий (3.6) реально выполняется в квантовых магнитных полях при низких температурах. Из (3.6)–(3.7) получим амплитуду долинного расщепления при $T = 0$

$$\Delta_0 = 2J\Xi_u^2 n_l / 3\rho v_t^2 \quad (3.8)$$

и температуру фазового перехода

$$T_0 = \Delta_0 / 4K_B. \quad (3.9)$$

Все соотношения, полученные в данном разделе статьи, сохраняют свою силу и при учете анизотропии упругих свойств кристалла, если вместо скоростей звука в изотропной среде v_l и v_t использовать известные выражения для скоростей продольной и поперечной акустических волн, распространяющихся вдоль оси квантования [111]:

$$v_l = \left[(c_{11} + 2c_{12} + 4c_{44}) / 3\rho \right]^{1/2}, \quad v_t = \left[(c_{11} - c_{12} + c_{44}) / 3\rho \right]^{1/2}.$$

4. Заключение

Обсудим теперь, как скажется рассмотренный эффект на магнитоосцилляционных явлениях. Период осцилляций Шубникова-де Гааза в квазидвумерной системе равен периоду прохождения уровня Ферми через уровни Ландау. Поскольку концентрация электронов на заполненном уровне Ландау одной долины $n_l = eV/h$, определяемый из эффекта Шубникова-де Гааза фактор долинного вырождения $g_v = \frac{\Delta n_s}{n_l}$, где Δn_s — соответствующее периоду осцилляций изменение концентрации электронов в инверсионном канале, осуществляемое изменением затворного напряжения при неизменной индукции магнитного поля B . Из проведенного ранее анализа следует, что период прохождения уровня Ферми через уровни Ландау равен $\Delta n_s = 2n_l$. Поэтому фактор долинного вырождения, определяемый из периода осцилляций Шубникова-де Гааза, равен $g_v = 2$, что находится в согласии с известными экспериментальными данными [1].

Список литературы

- [1] Т. Андо, А. Фаулер, Ф. Стерн. *Электронные свойства двумерных систем* (М., Мир, 1985).
- [2] О.В. Кибис, В.С. Шадрин. ФТТ, 27, 1878 (1985).
- [3] В.А. Кочелап, В.Н. Соколов, В.Ю. Венгалис. *Фазовые переходы в полупроводниках с деформационным электрон-фононным взаимодействием* (Киев, Наук. думка, 1984).

Редактор В.В. Чалдышев

The influence of quantizing magnetic field on the energy spectrum of electrons in quasi-two-dimensional layers of multivalley semiconductors

O. V. Kibis

Novosibirsk State Technological University, 630092 Novosibirsk, Russia