

Поперечный термомагнитный эффект в двоякопериодических полупроводниковых сверхрешетках без центра инверсии

© А.А. Перов, П.В. Пикунов

Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
603950 Нижний Новгород, Россия

E-mail: wkb@inbox.ru

Поступила в Редакцию 2 марта 2022 г.

В окончательной редакции 25 марта 2022 г.

Принята к публикации 25 марта 2022 г.

В одноэлектронном приближении во внешнем магнитном поле при наличии градиента температуры рассчитана поверхностная плотность тока носителей заряда в двумерных двоякопериодических полупроводниковых сверхрешетках n -типа. Магнитное поле предполагалось постоянным и однородным, приложенным перпендикулярно плоскости электронного газа. В результате совместного решения уравнения Шредингера и кинетического уравнения Больцмана показано, что зависимости поверхностной плотности поперечного тока от температуры и модуля градиента температуры имеют существенно нелинейный характер, присутствуют участки с отрицательной поперечной дифференциальной проводимостью. Зависимость времени релаксации от квазиимпульса электрона учтена в модели феноменологически через закон дисперсии носителей в магнитных подзонах. В отсутствие центра инверсии электростатического поля сверхрешетки законы дисперсии электрона в магнитных блоховских подзонах не являются четными функциями проекций квазиимпульса в магнитной зоне Бриллюэна. Как следствие, многократно возрастает величина поверхностной плотности поперечного термомагнитного тока по сравнению со случаем центросимметричного потенциала поля сверхрешетки.

Ключевые слова: термомагнитный эффект, двумерные двоякопериодические полупроводниковые сверхрешетки.

DOI: 10.21883/FTP.2022.08.53138.24A

1. Введение

Известно, что магнитное поле квантует поперечное движение заряженной частицы, а поле кристаллической решетки приводит к образованию энергетических зон. В результате в зонах проводимости и в валентной зоне полупроводников в магнитном поле формируются „лестницы“ уровней Ландау. В действительности, как показывают результаты первых теоретических работ, выполненных в середине прошлого столетия [1,2], уровни Ландау в кристаллах уширяются в зоны экспоненциально малой ширины. Причиной этого является снятие вырождения состояний в магнитном поле по центру орбиты вследствие взаимодействия заряженной частицы с электростатическим периодическим полем кристалла.

Непараболичность закона дисперсии носителей в материалах приводит к нетривиальному поведению термомагнитных [3–6], магнитотранспортных [7] и магнитооптических [8] эффектов. Так, в работе [3] рассчитан коэффициент Нернста–Эттинсгаузена (НЭ) в одномерных сверхрешетках с косинусоидальным законом дисперсии. В сильных магнитных полях, ориентированных в плоскости слоя сверхрешетки, при рассеянии носителей на полярных оптических фонах коэффициент НЭ изменял знак. В кристаллах селенида ртути с примесями атомов галлия и железа поперечный эффект НЭ протекал со сменой его знака, если изменять концентрацию примесных атомов галлия, определяю-

щих степень упорядочения ионов железа в образце [4]. В работе [5] исследованы осцилляции коэффициента Нернста в щелевом и бесщелевом графене с учетом зависимости положения уровней Ландау от величины электрического поля. В недавней работе [6] построена квантовая кинетическая теория термоэлектрического транспорта в магнитном поле. Учет топологической фазы Берри магнитных подзон блоховских электронов, приводящей к возникновению аномальной скорости носителей, позволил авторам рассчитать эффект Нернста, показав справедливость соотношений Онзагера в рамках развитой ими кинетической теории.

Предметом нашего исследования является двумерный электронный газ в области полупроводникового гетероперехода с поверхностной двоякопериодической сверхрешеткой с периодом a , помещенный в постоянное однородное перпендикулярное магнитное поле. На рис. 1 представлена типичная схема такой структуры. В присутствии градиента температуры в плоскости гетероперехода в направлении, перпендикулярном магнитному полю и ∇T , возникает поверхностный термомагнитный ток. В данной работе использована простая модель знакопеременного периодического электростатического потенциала сверхрешетки, которая, по нашему мнению, призвана отразить фундаментальные свойства электронного спектра и особенности возникновения поперечного термомагнитного тока в изучаемых структурах. Эффект возникновения нернстовского тока сам по себе не яв-

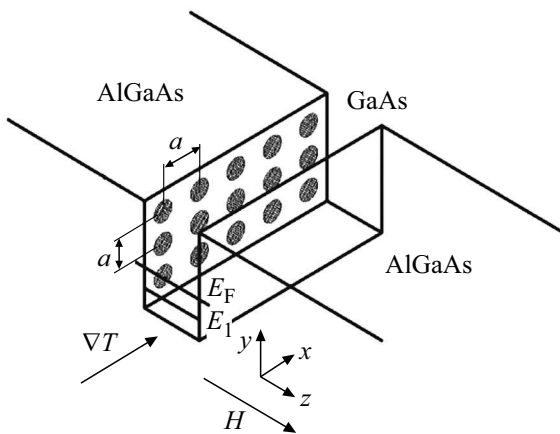


Рис. 1. Схема полупроводникового гетероперехода с поверхностной сверхрешеткой, помещенного в перпендикулярное магнитное поле \mathbf{H} .

ляется новым, но в рассматриваемых модельных структурах в отсутствие центра инверсии поля сверхрешетки ранее в литературе не освещался и не обсуждался.

Сверхрешетки, созданные методами электронной литографии, являются предпочтительными в плане проведения магнитотранспортных экспериментов, прежде всего благодаря высокой степени своей периодичности. Возможно также создавать сверхрешетки с различной симметрией элементарной ячейки, нарушать инверсионную симметрию, конструируя двумерный нецентросимметричный искусственный кристалл. При наложении внешнего магнитного поля законы дисперсии носителей заряда в магнитных блоховских подзонах уже не будут четными функциями квазиимпульса, что, по нашему мнению, определенным образом должно отразиться на течении эффекта НЭ в двумерном электронном газе таких структур. Несомненно, потребуется развитие уже имеющихся экспериментальных технологий формирования сверхрешеток малой периодичности и магнитотранспортных измерений. Кроме того, экспериментальные образцы должны быть достаточно чистыми, чтобы уширение магнитных подзон спектра электронов не превышало величин разделяющих их энергетических щелей.

Для актуальных для современных экспериментов параметров полупроводниковых сверхрешеток [9–11] и величин напряженности магнитного поля порядка нескольких десятков тысяч эрстед типичное расщепление в спектре носителей, обусловленное действием электростатического поля сверхрешетки на электрон, оказывается много меньше характерной энергии Ландау $\hbar\omega_c$. Поэтому становится возможным производить модельные расчеты квантовых состояний электрона в одноуровневом приближении, когда можно пренебречь примесью состояний Ландау в состояниях магнитных блоховских подзон данного уровня $E_S = \hbar\omega_c(S + 1/2)$ с заданным значением номера S . Кроме того, так как характерный

период сверхрешеток в несколько десятков нанометров на 2 порядка превосходит масштаб естественной периодичности кристалла, использование приближения изотропной эффективной массы в Γ -точке является оправданным.

2. Теоретическая модель и метод расчета

Классификация электронных состояний во внешних постоянном однородном магнитном и двоякопериодическом электростатическом полях по неприводимым проективным представлениям группы магнитных трансляций возможна лишь в случае, когда магнитное поле ориентировано перпендикулярно плоскости газа носителей [12]. При этом необходимо также, чтобы число квантов магнитного потока, пронизывающего элементарную ячейку кристалла, было рациональным числом $\Phi/\Phi_0 = eHa^2/2\pi\hbar c = p/q$. В результате электронная волновая функция также является собственной функцией оператора магнитной трансляции и удовлетворяет обобщенным условиям Блоха в магнитном поле [13] (условиям Блоха–Пайерлса).

Гамильтониан, описывающий квантово-механическое движение электрона в рассматриваемой системе, имеет вид

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V_1(\cos 2\pi x/a + \cos 2\pi y/a)\hat{E} + V_2(\sin 2\pi x/a + \sin 2\pi y/a)\hat{E}, \quad (1)$$

где $V_{1,2}$ — амплитуды модельного периодического потенциала сверхрешетки ($V_1 = 1$ мэВ, $V_2 = \gamma V_1$), \hat{H}_0 — гамильтониан электрона в постоянном однородном магнитном поле, \hat{E} — единичный оператор. Предполагается заполненным низший уровень размерного квантования E_1 в области гетероперехода (рис. 1). Эффективная масса электрона m^* в GaAs взята равной $0.067m_e$, период сверхрешетки $a = 50$ нм. При значениях $\gamma = 0$ потенциал поля сверхрешетки становится центросимметричным: $V(\mathbf{r}) = V(-\mathbf{r})$.

Волновая функция электрона в μ -й магнитной подзоне ($\mu = \bar{1}, p$), удовлетворяющая обобщенным граничным условиям Блоха в магнитном поле, представляется в виде симметризованной линейной комбинации базисных состояний Ландау φ_0 основного уровня в постоянном магнитном поле:

$$\Psi_{\mathbf{k}}^{\mu}(x, y) = \sum_{n=1}^p C_n^{\mu}(\mathbf{k}) \sum_{l=-\infty}^{+\infty} \exp(ik_x a(lq + nq/p) + 2\pi i y(lp + n)/a) \exp(ik_y y) \times \varphi_0((x - x_0 - lqa - nqa/p)/l_H), \quad (2)$$

где l_H — магнитная длина, $x_0 = c\hbar k_y/eH = k_y l_H^2$. Волновые функции (2) представляют собой p -мерное расщепление над двумерным тором — магнитной зоной Бриллюэна (МЗБ): $-\pi/qa \leq k_x \leq \pi/qa$, $-\pi/a \leq k_y \leq \pi/a$.

Численное решение задачи на собственные значения и собственные функции для гамильтониана (1) проводилось нами путем унитарных преобразований базиса, сохраняющих норму вектора.

3. Результаты и обсуждение

В работе были проведены расчеты положения магнитных подзон Ландау нулевого уровня энергии в магнитном поле в зависимости от числа квантов магнитного потока через элементарную ячейку сверхрешетки. Амплитуды нецентросимметричного периодического потенциала сверхрешетки приняты в расчетах равными $V_1 = 1$ мэВ, $V_2 = \gamma V_1$ при значениях $\gamma = 0.0, 0.1, 0.3$. Количество магнитных подзон совпадает с числителем дроби p/q . На рис. 2 приведены результаты соответствующих расчетов для случая центросимметричного потенциала сверхрешетки при $\gamma = 0.0$.

Закон дисперсии носителей в нижней магнитной подзоне нулевого уровня Ландау приведен на рис. 3 при числе квантов потока $p/q = 3/1$. Модуль вектора напряженности магнитного поля при указанных выше значениях периода сверхрешетки и числа квантов магнитного потока равен $H = 4.97 \cdot 10^4$ Э. Ширина расщепленной зонной структуры при этом много меньше характерной энергии Ландау $\hbar\omega_c = 2\pi\hbar^2 p/m^* a^2 q \approx 8.6$ мэВ. Положение уровня Ферми в модели таково, что заполнена низшая магнитная подзона Ландау ($\mu = 1$), и концентрация носителей заряда составляет величину порядка $n = 1.3 \cdot 10^{11}$ см $^{-2}$. Так как модельный периодический потенциал сверхрешетки не обладает центром инверсии при $\gamma = 0.1$, согласно теореме Крамерса, в магнитном поле законы дисперсии электрона в подзонах не являются четными функциями проекций квазиимпульса в МЗБ.

Расчетам поверхностной плотности термомагнитного поперечного тока (в y -направлении)

$$j_y^\mu = (2e/\hbar^2) \int v_y^\mu f^\mu(\mathbf{k}, \xi) dp_x dp_y \quad (3)$$

в нижней магнитной подзоне Ландау ($\mu = 1$) предшествовало численное решение квазиклассического однородного кинетического уравнения Больцмана в релаксационном приближении ($\tau > 2\pi\hbar/kT$):

$$(|e|\alpha\xi/\hbar) \frac{\partial f^\mu(\mathbf{k}, \xi)}{\partial k_x} = -(f^\mu(\mathbf{k}, \xi) - F^\mu(\mathbf{k}))/\tau, \quad (4)$$

где $F^\mu(\mathbf{k}) = f^\mu(\mathbf{k}, 0)$ — равновесная функция распределения Ферми–Дирака, $\xi = (\nabla T)_x$, α — постоянная Зеебека (для GaAs $\alpha \approx 3 \cdot 10^{-6}$ СТГ $_V$ /K [14]).

Зависимость времени импульсной релаксации от квазиимпульса электрона учтена нами феноменологически через закон дисперсии двумерных носителей $\varepsilon(\mathbf{p})$ в рамках наиболее подходящей модели слабо взаимодействующих квантовых ям, развитой в работе [15]: $\tau(\mathbf{p}) \sim (kT)^\beta \varepsilon(\mathbf{p})^{\alpha+0.5}$. Расчеты поперечного тока были проведены нами для случаев рассеяния электрона на

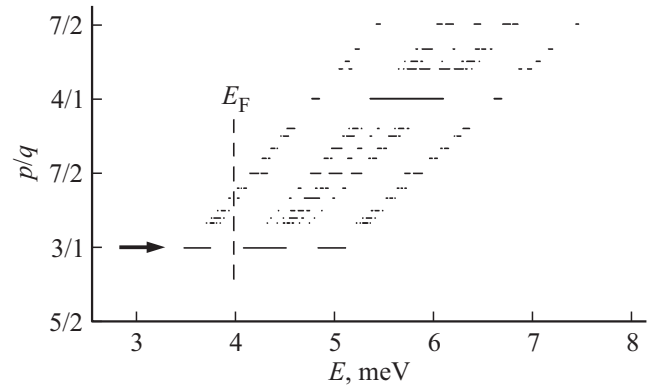


Рис. 2. Зависимость положения магнитных блоховских подзон, относящихся к основному уровню Ландау, от числа квантов магнитного потока через элементарную ячейку сверхрешетки в модельной структуре AlGaAs/GaAs/AlGaAs при параметрах: $V_1 = 1$ мэВ, $\gamma = 0$, $m^* = 0.067m_0$, $a = 50$ нм.

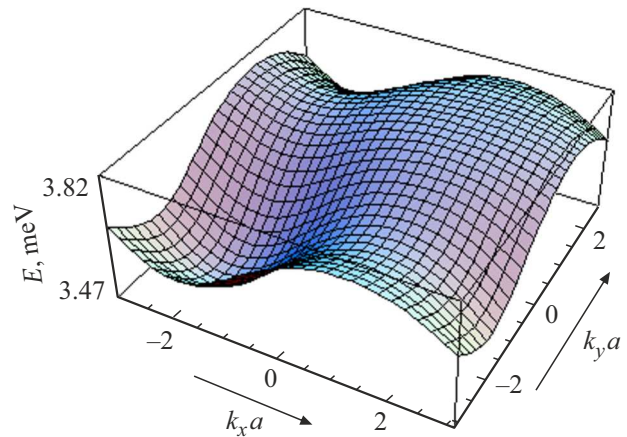


Рис. 3. Закон дисперсии в нижней магнитной подзоне, относящейся к основному уровню Ландау, при $p/q = 3/1$ в модельной структуре AlGaAs/GaAs/AlGaAs с параметрами: $V_1 = 1$ мэВ, $\gamma = 0.1$, $m^* = 0.067m_0$, $a = 50$ нм.

нейтральных примесях ($\alpha = 0$, $\beta = 0$) и продольных акустических фононах, создающих для носителей заряда деформационный потенциал (ДА-рассеяние) ($\alpha = -0.5$, $\beta = -1$). Важно заметить здесь, что независимо существующее от деформационно-акустического рассеяния пьезоэлектрическое рассеяние (ПА-рассеяние) характерно для кристаллов со структурой цинковой обманки, а пьезопотенциал для электронов в Γ -долине создают как поперечные, так и продольные фононы [16]. В то же время импульсная релаксация носителей заряда при низких температурах в основном определяется, конечно же, упругим рассеянием на ионах примеси и нейтральных атомах.

Проекция вектора скорости $v_y^\mu(\mathbf{k})$ электрона и его эффективная масса в μ -й подзоне Ландау существенно образом зависят от точки в магнитной зоне Бриллюэна вследствие непараболичности спектра и наличия инвер-

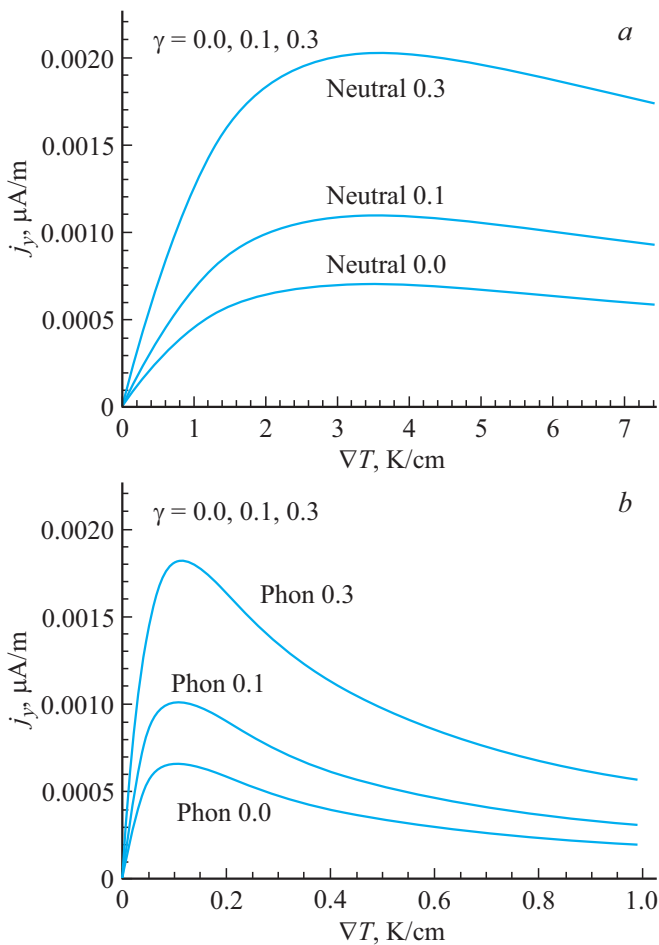


Рис. 4. Зависимость y -проекции поверхностной плотности термомангнитного тока в нижней магнитной подзоне ($\mu = 1$) от величины градиента температуры при $T = 2\text{ K}$ при трех значениях параметра асимметрии γ : a — рассеяние на нейтральных атомах примеси; b — рассеяние на акустических фоновых.

сионной асимметрии поля сверхрешетки. На рис. 4, a и b представлены результаты расчетов y -проекции поверхностной плотности тока в изучаемой модельной структуре в зависимости от величины градиента температуры в случаях рассеяния носителей заряда на нейтральных атомах примеси и акустических фоновых соответственно. Температура электронного газа в области гетероперехода со сверхрешеткой в модельных расчетах взята равной $T = 2\text{ K}$. При малых значениях величины градиента температуры кинетическое уравнение Больцмана может быть решено аналитически [17]. В этом случае неравновесная поправка к функции распределения линейна по $|\nabla T|$, что и подтверждается численным расчетом. С ростом градиента температуры начальный линейный рост функции $j_y^1(\xi)$ сменяется участком ее убывания, плотность термомангнитного тока имеет максимум. По мере возрастания величины градиента температуры функция распределения меняется таким образом, что вклад в (3) от состояний носителей с

положительной проекцией скорости в подзоне Ландау возрастает. Это приводит к увеличению значения $j_y^1(\xi)$ вплоть до максимального на каждой из зависимостей. При дальнейшем возрастании модуля градиента температуры функция распределения носителей по импульсам не имеет ярко выраженного максимума в МЗБ и равновелико учитывает вклад в ток от состояний как с положительной, так и отрицательной y -проекцией скорости. Имеет место участок с отрицательной поперечной дифференциальной проводимостью. При фоновом рассеянии становится вполне оправданным смещение максимума плотности тока в область меньших значений градиента температуры. Время релаксации становится зависящим от абсолютной температуры газа, и область значений градиента температуры, отвечающая участку с отрицательной дифференциальной поперечной проводимостью, расширяется (рис. 4, b). Характерная ширина пика плотности тока на рис. 4, b становится меньше по сравнению со случаем, когда имеет место лишь примесное рассеяние. Таким образом, результаты проведенных в нашей работе модельных расчетов поверхностной плотности поперечного термомангнитного тока говорят о достаточно высокой чувствительности эффекта НЭ к механизму рассеяния носителей заряда.

С увеличением отношения γ величина термомангнитного тока возрастает при фиксированном значении модуля градиента температуры. Это связано с нарушением четности закона дисперсии носителей в магнитном поле и, как следствие, дополнительным нетривиальным вкладом в поперечную скорость. При указанных значениях отношения γ имеет место трехкратное усиление эффекта Нернста–Эттинсгаузена на максимуме термомангнитного тока.

Качественно обсудим вклад в термомангнитный ток от эффектов спинового и спин-орбитального расщеплений в спектре носителей. В рамках моделей, эквивалентных рассмотренной в данной работе, ранее нами были проведены расчеты квантовых состояний электронов в двоякопериодических сверхрешетках в перпендикулярном магнитном поле с учетом электронного спина (см., например, [7,8]). Спин-орбитальное (СО) взаимодействие в электронном газе учитывалось как по типу Рашба, так и по типу Дрессельхауза для двумерных систем. В обоих случаях спиновая поляризация квантовых состояний носителей в магнитной зоне Бриллюэна имела вихревую структуру в плоскости газа. Величины спинового, спин-орбитального расщеплений в спектре, а также расщепления, определяемого действием на электрон периодического электростатического поля сверхрешетки с указанными в настоящей работе параметрами, сопоставимы между собой в магнитных полях порядка нескольких десятков тысяч эрстед. В силу связи спиновых и координатных степеней свободы электрона его скорость, например, в y -направлении в некотором квантовом состоянии будет определяться проекцией спиновой поляризации этого состояния на x -направление (СО-взаимодействие Рашба)

и u -направление (СО-взаимодействие Дрессельхауза). Качественные оценки и предварительные расчеты показывают, что можно ожидать некоторого незначительного, определяемого константой СО-взаимодействия, вклада в термомагнитный ток $j_y^\mu(\xi)$ от проекций спиновой поляризации состояний в линейной области явления переноса при наличии спин-орбитального взаимодействия в электронном газе. При этом функция распределения Больцмана мало отличается от равновесной, и вклад в термомагнитный ток определяется в основном полем скоростей носителей в подзоне. С возрастанием модуля градиента температуры результаты численного решения задачи свидетельствуют о значительной компенсации вкладов в ток от состояний носителей в магнитной зоне Бриллюэна: практически равновелико функция распределения Больцмана учитывает состояния с проекциями v_y^μ противоположных знаков. В итоге плотность термомагнитного тока уменьшается, и, соответственно, вклады в ток от спиновой поляризации состояний носителей становятся ничтожно малыми на фоне значений убывающей функции $j_y^\mu(\xi)$.

4. Заключение

Спектр материалов, где теоретически и экспериментально изучаются термомагнитные эффекты в газе носителей заряда, необычайно широк. Двокопериодические полупроводниковые сверхрешетки составляют класс таких материалов, где исследование транспорта носителей представляет интерес не только с точки зрения фундаментальной науки, но и с позиций прикладного характера. В настоящей работе произведены необходимые расчеты и указаны области магнитных полей и параметров решеточных структур, когда становится возможным экспериментальное изучение эффекта НЭ в таких сверхрешетках. Рассчитанные в рамках модели зависимости поверхностной плотности тока от градиента температуры демонстрируют существенно нелинейное поведение. Имеет место эффект отрицательной дифференциальной поперечной проводимости. Установлены причины такой нелинейности, обусловленной различным вкладом в ток магнитных блоховских состояний электрона в подзоне. Нарушение четности закона дисперсии носителей в подзонах Ландау в магнитном поле вследствие отсутствия центра инверсии периодического электростатического потенциала поля сверхрешетки, как следствие, приводит к дополнительному нетривиальному вкладу в поперечную скорость. При указанных значениях отношения γ имеет место многократное усиление эффекта НЭ на максимуме поперечного термомагнитного тока.

Расчет времени релаксации импульса носителей в системах с произвольным законом дисперсии является, вообще говоря, задачей не решаемой. В двумерных полупроводниковых сверхрешетках во внешнем перпендикулярном однородном магнитном поле зависимость энергии электрона от его квазиимпульса в магнитной зоне

Бриллюэна существенно непараболична, а число магнитных блоховских подзон определяется числом квантов магнитного потока через элементарную ячейку сверхрешетки. Магнитное поле, таким образом, не только квантует поперечное движение носителя заряда, но и является управляющим параметром, от величины которого зависит общее число магнитных подзон спектра. В то же время известно, что эффект Нернста–Эттингаузена в полупроводниках имеет место быть благодаря тому, что носители заряда с различными импульсами по-разному рассеиваются при взаимодействии с примесями и колебаниями решетки. Поэтому в контексте возможного использования результатов нашей работы при постановке соответствующих транспортных экспериментов с электронным газом необходимо отметить роль полученных в рамках обозначенной в работе модели результатов как отправной точки при изучении механизмов рассеяния двумерных электронов двокопериодических сверхрешеток в магнитном поле.

Финансовая поддержка

Работа поддержана Министерством науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания № 0729-2020-0058.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] P.G. Harper. Proc. Phys. Soc. A, **68**, 879 (1955).
- [2] F.A. Butler, E. Brown. Phys. Rev. B, **166**, 630 (1968).
- [3] С.Р. Фигарова, Г.И. Гусейнов, В.Р. Фигаров. ФТП, **52** (7), 712 (2018).
- [4] И.Г. Кулеев, А.Т. Лончаков, Г.Л. Штрапенин, И.Ю. Арапова. ФТП, **39**, 1767 (1997).
- [5] З.З. Алисултанов. Письма ЖЭТФ, **99** (12), 813 (2014).
- [6] Akihiko Sekine, Naoto Nagaosa. Phys. Rev. B, **101**, 155204 (2020).
- [7] V.Ya. Demikhovskii, A.A. Perov. Phys. Rev. B, **75**, 205307 (2007).
- [8] A.A. Perov, L.V. Solnyshkova, D.V. Khomitsky. Phys. Rev. B, **82**, 165328 (2010).
- [9] C. Albrecht, J.H. Smet, K. von Klitzing, D. Weiss, V. Umansky, H. Schweizer. Phys. Rev. Lett., **86**, 147 (2001).
- [10] M.C. Geisel, J.H. Smet, V. Umansky, K. von Klitzing, B. Naundorf, R. Ketzmerick, H. Schweizer. Phys. Rev. Lett., **92**, 256801 (2004).
- [11] T. Schlösser, K. Ensslin, J.P. Kotthaus, M. Holland. Semicond. Sci. Technol., **11**, 1582 (1996).
- [12] Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский. *Теоретическая физика*. Т 9 (М., Наука, 1978) § 60, с. 292.
- [13] D.J. Thouless, M. Kohmoto, M.P. Nightingale, M. den Nijs. Phys. Rev. Lett., **49**, 405 (1982).
- [14] S.K. Sutradhar, D. Chattopadhyay. J. Phys. C: Solid State Phys., **12**, 1693 (1979).
- [15] С.И. Борисенко. ФТП, **33** (10), 1240 (1999).

[16] В. Карпус. ФТП, **22**, 439 (1988).

[17] А.И. Ансельм. *Введение в теорию полупроводников* (М., Наука, 1978).

Редактор А.Н. Смирнов

Transverse thermo-magnetic effect in double-periodic semiconductor superlattice at the lack of inversion symmetry

A.A. Perov, P.V. Pikunov

Nizhny Novgorod Lobachevsky State University,
603950 Nizhny Novgorod, Russia

Abstract The surface density of charge current in two-dimensional double-periodic *n*-type semiconductor superlattices is calculated in the one-electron approximation in an external magnetic field in the presence of a temperature gradient. The magnetic field was assumed to be constant, uniform, applied perpendicular to the plane of the electron gas. The joint solution of the Schrödinger equation and the kinetic Boltzmann equation is shown that the dependence of the transverse surface density of the current about temperature and module temperature gradient are significantly non-linear in nature, there are areas with negative differential conductivity. The dependence of the relaxation time on the quasi-momentum of the electron is taken into account in the model phenomenologically through the dispersion law of carrier in magnetic subbands. At the lack of inversion symmetry the dispersion laws of magnetic subbands are not even functions of the quasimomentum defined in magnetic Brillouin zone. As a result, the transverse surface thermo-magnetic current increases in many times in comparison with symmetric case.