

Министерство образования и науки Российской Федерации
САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

**Приоритетный национальный проект «Образование»
Национальный исследовательский университет**

РАЗМЕРНОЕ КВАНТОВАНИЕ
Часть 2. ОПТИЧЕСКИЕ И КИНЕТИЧЕСКИЕ
СВОЙСТВА ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ
НАНОСТРУКТУР

*Рекомендовано Учебно-методическим объединением
по университетскому политехническому образованию
в качестве учебного пособия для студентов высших учебных
заведений, обучающихся по направлению
подготовки магистров «Техническая физика»*

Санкт-Петербург
Издательство Политехнического университета
2010

УДК 530.145 (075.8)

ББК 22.37я73

P17

Рецензенты:

Член-корреспондент РАН, проректор по образованию
Санкт-Петербургского академического университета —
научно-образовательного центра нанотехнологий РАН *А. Е. Жуков*
Доктор физико-математических наук, ведущий научный сотрудник
ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН *П. Н. Брунков*

Авторы:

В. Э. Гасумянц, С. Н. Лыков, Д. А. Пшенай-Северин, Д. А. Фирсов

Размерное квантование. Часть 2. Оптические и кинетические свойства полупроводниковых наноструктур : учеб. пособие / В. Э. Гасумянц [и др.]. — СПб. : Изд-во Политехн. ун-та, 2010. — 243 с.

Рассмотрены особенности оптических и кинетических свойств, возникающие вследствие пространственного ограничения движения носителей заряда, приводящего к существенной перестройке структуры энергетического спектра в квантоворазмерных структурах по сравнению с объемными полупроводниками. Описаны особенности фононного спектра и энергетического состояния примесей в наноструктурах; кинетические явления, включая квантовый эффект Холла; особенности процессов взаимодействия оптического излучения со свободными носителями заряда; приведены примеры применения квантоворазмерных структур в оптоэлектронных приборах.

Предназначено для студентов высших учебных заведений, обучающихся по магистерской программе «Физика нанотехнологий и наноразмерных структур» направления подготовки магистров «Техническая физика». Пособие может быть также использовано при обучении в системах повышения квалификации, в учреждениях дополнительного профессионального образования и пр.

Работа выполнена в рамках реализации программы развития национального исследовательского университета «Модернизация и развитие политехнического университета как университета нового типа, интегрирующего мультидисциплинарные научные исследования и надотраслевые технологии мирового уровня с целью повышения конкурентноспособности национальной экономики».

Печатается по решению редакционно-издательского совета Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

ISBN 978-5-7422-2949-0

© Санкт-Петербургский государственный
политехнический университет, 2010

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение.....	5
1. Фононы в системах с пониженной размерностью.....	7
1.1. Квантовый размерный эффект.....	7
1.2. Фононы в объемных кристаллах.....	9
1.3. Фононы в гетероструктурах.....	23
1.3.1. Акустические фононы в длинноволновом приближении.....	23
1.3.2. Коротковолновые акустические и оптические фононы.....	40
1.4. Электрон-фононное взаимодействие в квантовых ямах.....	44
1.4.1. Рассеяние электронов на деформационном потенциале.....	51
1.4.2. Рассеяние электронов на полярных фононах.....	53
2. Примесные состояния в системах с пониженной размерностью.....	56
2.1. Водородоподобный примесный центр.....	58
2.2. Интерфейсные дефекты.....	69
2.3. Уровни энергии электронов в легированных гетероструктурах.....	73
3. Кинетические явления в системах с пониженной размерностью.....	77
3.1. Кинетические коэффициенты объемных кристаллов.....	77
3.2. Кинетические коэффициенты двумерного электронного газа.....	85
3.3. Кинетические коэффициенты периодической сверхрешетки.....	93
3.4. Рассеяние электронов на ионах примеси в квантовых ямах.....	100
3.5. Квантовый эффект Холла.....	120
3.5.1. Наблюдение квантового эффекта Холла.....	120
3.5.2. Удельное сопротивление в системах различной размерности.....	127
3.5.3. Измерение холловского сопротивления.....	131
3.5.4. Циклотронная орбита электрона.....	134
3.5.5. Дрейф электронов в скрещенных полях.....	138
3.5.6. Учет рассеяния электронов на примесях.....	141
3.5.7. Квантовые состояния электрона в скрещенных полях.....	147
3.5.8. Отсутствие квантового эффекта Холла в идеальной системе.....	156

3.5.9. Роль хаотического потенциала	160
3.5.10. Краевые состояния	167
3.5.11. Дробный квантовый эффект Холла.....	172
4. Оптические явления в квантоворазмерных структурах.....	173
4.1. Основные механизмы поглощения света в квантовых ямах	173
4.2. Экситонное поглощение света.....	175
4.2.1. Экситоны в квантовых ямах	175
4.2.2. Влияние электрического поля на экситонное поглощение света. Размерный эффект Штарка.....	183
4.3. Влияние непараболичности и многочастичных эффектов на спектр межподзонного поглощения света в квантовых ямах.....	188
4.3.1. Эффекты непараболичности	189
4.3.2. Основные положения приближений Хартри и Хартри– Фока	199
4.3.3. Положение пика межподзонного поглощения света в реальных квантовых ямах	202
4.3.4. Влияние разогрева электронного газа на межподзонное поглощение света в квантовых ямах	207
4.4. Нелинейная оптика наноструктур	214
4.4.1. Линейная и нелинейная оптика	214
4.4.2. Нелинейные эффекты, связанные с виртуальными возбуждениями	219
4.4.3. Нелинейные эффекты при поглощении света.....	222
4.5. Применение квантоворазмерных структур в оптоэлектронных приборах.....	230
4.5.1. Прибор на электрооптическом эффекте с обратной связью	231
4.5.2. Лазер среднего инфракрасного и терагерцового диапазонов на межподзонных переходах электронов в квантовых ямах (каскадный лазер).....	235
Библиографический список.....	241

ВВЕДЕНИЕ

На современном этапе развития физики наибольший интерес вызывают исследования различных типов полупроводниковых квантоворазмерных структур (или наноструктур), разработка практически реализуемых устройств на основе которых поддерживается постоянно возрастающими возможностями новых технологий. Основные свойства этих объектов определяются тем, что пространственное ограничение движения носителей заряда в одном или нескольких направлениях приводит к существенной перестройке наиболее важной характеристики любого материала – структуры энергетического спектра, причем не только электронов, но и других квазичастиц.

Уникальные свойства полупроводниковых наноструктур, отличающие их от традиционных объемных полупроводников и структур на их основе, позволяют добиваться решения как минимум двух (естественно, связанных друг с другом) задач. Во-первых, в таких объектах зачастую возникают новые физические эффекты, исследование которых представляет несомненный интерес с точки зрения понимания фундаментальных свойств низкоразмерных объектов. Во-вторых, наноструктуры могут быть использованы для создания полупроводниковых приборов нового поколения, обладающих уникальными параметрами, что, собственно, и происходит в настоящее время, стимулируя тем самым широкое внедрение нанотехнологий в сферу практической деятельности.

Научная литература, посвященная особенностям свойств полупроводниковых наноструктур, крайне обширна, но представлена, преимущественно, либо в виде оригинальных статей в различных научных журналах, либо в виде монографий, опубликованных за рубежом на английском языке. Это существенно осложняет процесс обучения студентов по направлениям, связанным с низкоразмерной

физикой конденсированного состояния, нанотехнологиями и т. п., что и определяет необходимость в учебных пособиях на эту тему.

Данное учебное пособие является продолжением опубликованной в 2008 году первой части (В. Э. Гасумянц, С. Н. Лыков, Д. А. Пшенай-Северин, С. А. Рыков, Д. А. Фирсов. Размерное квантование. Часть 1. Энергетический спектр наноструктур : учеб. пособие. – СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2009. – 257 с.), в которой изложены такие базовые разделы физики полупроводниковых наноструктур как общие особенности энергетического спектра в структурах с пониженной размерностью, плотность состояний и статистика электронов, влияние на энергетический спектр непараболичности, сложной структуры валентной зоны, анизотропии и наличия в структурах внутренних напряжений. В публикуемой второй части пособия основное внимание уделено оптическим и кинетическим свойствам низкоразмерных объектов. Подробно изложены вопросы, связанные с изменением характеристик процесса рассеяния носителей заряда, вызванным понижением размерности рассматриваемых объектов, описаны особенности свойств как одиночных низкоразмерных объектов (квантовые ямы), так и структур на их основе (гетероструктуры и периодические сверхрешетки). Детально рассмотрен один из наиболее уникальных эффектов, возникающих в двумерных системах – квантовый эффект Холла, подробно проанализированы особенности взаимодействия оптического излучения с носителями заряда в полупроводниковых наноструктурах. В заключительной части пособия приведены примеры практического использования наноструктур в качестве рабочих элементов оптоэлектронных приборов нового поколения.

Учебное пособие предназначено для студентов старших курсов физических факультетов, аспирантов, преподавателей, а также всех желающих получить представление об уникальных особенностях свойств полупроводниковых наноструктур.

1. ФОНОНЫ В СИСТЕМАХ С ПОНИЖЕННОЙ РАЗМЕРНОСТЬЮ

1.1. КВАНТОВЫЙ РАЗМЕРНЫЙ ЭФФЕКТ

Ограничение движения электрона конечной областью пространства, линейные размеры которой сравнимы с длиной волны де Бройля, приводит к эффекту размерного квантования энергии – картина энергетических уровней электрона существенно изменяется по сравнению с электронным энергетическим спектром безграничного (объёмного) кристалла. Это явление мы подробно рассматривали в первой части учебного пособия. Эффект размерного квантования обусловлен тем, что волновые функции электрона в стационарных состояниях, принадлежащих энергетическим уровням E_n , отчасти подобны классическим волнам с частотами $\omega_n = E_n / \hbar$ в резонаторе конечных размеров. Уменьшение размеров резонатора существенно влияет на спектр его собственных частот ω_n ; этот эффект составляет классическую аналогию квантовому размерному эффекту. Кроме того, по аналогии с отражением световых волн от границы двух сред или с интерференцией световых волн в тонких пластинках и слоистых структурах, существует отражение от гетерограниц и интерференция электронных волн в системах пониженной размерности – в квантовых ямах, в сверхрешётках. Указанные волновые аспекты квантово-механического поведения электрона автоматически учитываются при решении уравнения Шредингера с определёнными граничными условиями, налагаемыми на электронную волновую функцию $\psi(\mathbf{r})$.

В кристалле наряду с электронными возбуждениями или световыми волнами могут распространяться и другие возбуждения волнового характера, в частности, – колебания кристаллической решётки. Уравнения динамики атомов (или ионов), составляющих

кристаллическую решётку, определяют спектр собственных частот решётки $\omega_j(\mathbf{q})$ и возможные типы её колебаний. В этом отношении уравнения динамики решётки играют такую же важную роль, какую выполняют уравнения Максвелла в изучении световых волн или уравнение Шредингера для электронных «волн де Бройля».

Каждой собственной частоте $\omega_j(\mathbf{q})$ соответствует определённый тип движения атомов кристалла, называемый колебательной модой решётки. Моды различаются направлением колебаний атомов (поляризацией колебаний), а также направлением распространения волны колебаний и длиной волны – последние две характеристики задаются волновым вектором \mathbf{q} . Согласно законам квантовой механики, энергия гармонических колебаний любой физической системы складывается из дискретных порций, квантов. Квант энергии световой волны – фотон. Кванты энергии $\hbar\omega_j(\mathbf{q})$ колебаний кристаллической решётки по аналогии с фотонами называют фононами, и поэтому о спектре собственных частот решётки обычно говорят как о спектре *фононных мод*.

В уравнения динамики кристаллической решётки входят массы атомов и силы межатомных связей. Этими параметрами материала и определяется спектр фононных мод, так что у разных материалов фононные моды различаются. Следовательно, в системах пониженной размерности наличие границ между различающимися материалами приводит к дополнительным условиям, налагаемым на решения уравнений динамики атомов, и, как результат, – к модификации спектров фононных мод.

В настоящем разделе мы рассмотрим особенности в спектрах фононов, возникающие в гетероструктурах, в которых наблюдается размерное квантование электронного газа – в квантовых ямах и сверхрешетках. Будут рассмотрены также особенности рассеяния электронов на фононах в таких наноструктурах. Предварительно мы напомним основные сведения о фононах в объёмных материалах.

1.2. ФОНОНЫ В ОБЪЕМНЫХ КРИСТАЛЛАХ

Физика колебаний кристаллической решетки в объемных материалах изложена в ряде монографий и учебников (см., например, [1]), поэтому приведем лишь краткие сведения из этой области.

В рамках классической механики колебания решетки можно описывать векторами смещения $\mathbf{u}_\alpha(t)$ атомов из положения равновесия. Каждый вектор смещения удовлетворяет уравнению динамики:

$$M_\alpha \frac{d^2 \mathbf{u}_\alpha}{dt^2} = \mathbf{F}_\alpha, \quad \alpha = 1, 2, \dots, N, \quad (1.1)$$

где \mathbf{F}_α – сила, действующая на атом с номером α со стороны других атомов, M_α – масса атома, N – количество атомов в кристалле. Декартовы компоненты F_α^i вектора \mathbf{F}_α определяются производными по компонентам u_α^i вектора смещения от энергии взаимодействия атомов $\Phi(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_N)$:

$$F_\alpha^i = -\frac{\partial \Phi}{\partial u_\alpha^i}, \quad i = x, y, z. \quad (1.2)$$

Обычно амплитуды колебаний атомов малы по сравнению с межатомными расстояниями в кристаллической решётке, поэтому можно пользоваться приближённым выражением для Φ , а именно – первыми исчезающими членами разложения Φ в ряд по степеням векторов смещения. Равным нулю смещениям отвечает положение равновесия атомов и, следовательно, минимум энергии Φ . В минимуме первые производные функции Φ равны нулю (то есть силы (1.2) в положении равновесия равны нулю), так что разложение для Φ начинается с квадратичных членов. Если отбросить все члены

разложения более высокого порядка малости, то функция $\Phi(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_N)$ будет иметь вид квадратичной формы, и тогда её первые производные (1.2) будут линейными функциями векторов смещения:

$$F_{\alpha}^i = - \sum_{\beta, k} V_{\alpha\beta}^{ik} u_{\beta}^k, \quad \beta = 1, 2, \dots, N, \quad k = x, y, z, \quad (1.3)$$

где коэффициенты $V_{\alpha\beta}^{ik}$, называемые силовыми постоянными, характеризуют жёсткость межатомных связей. Такое приближение называется *гармоническим*.

Частные решения уравнений (1.1) с учётом гармонического приближения (1.3) должны иметь вид гармонических колебаний, их можно записать в виде:

$$u_{\alpha}^k(t) = \frac{A_{\alpha}^k}{\sqrt{M_{\alpha}}} \exp(-i\omega t). \quad (1.4)$$

При этом система дифференциальных уравнений (1.1) преобразуется в алгебраическую систему линейных однородных уравнений для комплексных амплитуд колебаний A_{α}^k :

$$\omega^2 A_{\alpha}^i = \sum_{\beta, k} \frac{V_{\alpha\beta}^{ik}}{\sqrt{M_{\alpha}M_{\beta}}} A_{\beta}^k. \quad (1.5)$$

Система (1.5) представляет собой известную из курса линейной алгебры задачу о поиске собственных значений ω^2 и собственных векторов A_{α}^i матрицы $D_{\alpha\beta}^{ik}$:

$$D_{\alpha\beta}^{ik} = \frac{V_{\alpha\beta}^{ik}}{\sqrt{M_{\alpha}M_{\beta}}}. \quad (1.6)$$

Матрица (1.6) называется *динамической матрицей*. Она имеет формат $3N \times 3N$. Её собственные значения – это решения характеристического уравнения степени $3N$ системы (1.5) для ω^2 , которое является условием наличия ненулевых решений данной системы:

$$\det \left(D_{\alpha\beta}^{ik} - \omega^2 \delta_{ik} \delta_{\alpha\beta} \right) = 0. \quad (1.7)$$

Количество решений ω_l^2 равно степени уравнения (1.7), так что индекс l , нумерующий собственные частоты, должен принимать $3N$ значений. Другими словами, *количество собственных частот равно числу степеней свободы колебательной системы*; действительно, здесь N – количество атомов в кристалле, 3 – число степеней свободы для движения атома, как целого.

Теперь учтём трансляционную симметрию решётки. Сначала рассмотрим простую кристаллическую структуру – решётку с одним атомом в каждой элементарной ячейке. В этом случае можно считать, что атомы располагаются в узлах решётки Браве, и поэтому номерами атомов (α, β, \dots) служат векторы решётки Браве ($\mathbf{R}, \mathbf{R}', \dots$). Трансляционная симметрия решётки проявляется следующим образом. Во-первых, силовые постоянные в (1.5) зависят не от самих номеров атомов, а только от их разности:

$$V_{\alpha\beta}^{ik} \equiv V_{\mathbf{R}-\mathbf{R}'}^{ik}, \quad (1.8)$$

причём массы M всех атомов в простой решётке одинаковы. Во-вторых, частные решения уравнений динамики должны подчиняться *теореме Блоха*: изменение амплитуды колебаний $A_{\alpha}^k \equiv A_{\mathbf{R}}^k$ при замене \mathbf{R} на $\mathbf{R} - \mathbf{R}'$ должно сводиться к умножению на фазовый множитель $\exp(-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}')$. Это означает, что амплитуды $A_{\mathbf{R}}^k$ атомов в различных

узлах \mathbf{R} для одной и той же собственной частоты различаются лишь фазовым множителем, причём с фазой, линейно зависящей от \mathbf{R} :

$$A_{\mathbf{R}}^k = e_{\mathbf{q}}^k \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}). \quad (1.9)$$

Волновой вектор \mathbf{q} здесь вводится как величина, нумерующая решения и необходимая для того, чтобы получить скалярное, безразмерное, линейное по \mathbf{R} выражение для фазы: $\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}$.

Подставив (1.8) – (1.9) в (1.5) и записывая сумму по $\beta \equiv \mathbf{R}'$ как сумму по $\mathbf{R} - \mathbf{R}'$, получим систему уравнений для векторов поляризации колебаний $\mathbf{e}_{\mathbf{q}}$:

$$\sum_{k=x,y,z} D_{\mathbf{q}}^{ik} e_{\mathbf{q}}^k = \omega^2 e_{\mathbf{q}}^i, \quad i = x, y, z, \quad (1.10)$$

где

$$D_{\mathbf{q}}^{ik} = \frac{1}{M} \sum_{\mathbf{R}-\mathbf{R}'} V_{\mathbf{R}-\mathbf{R}'}^{ik} \exp(i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}' - \mathbf{R})). \quad (1.11)$$

Матрица $D_{\mathbf{q}}^{ik}$ эрмитова, причём она аналитически зависит от волнового вектора \mathbf{q} и имеет формат 3×3 . Поэтому задача на собственные значения (1.10) определяет три собственные частоты $\omega_{j\mathbf{q}} \equiv \omega_j(\mathbf{q})$, и они будут непрерывными функциями от \mathbf{q} ; их называют *ветвями* спектра частот, $j = 1, 2, 3$ – номер ветви. Каждой частоте $\omega_j(\mathbf{q})$ отвечает конкретный вектор поляризации колебаний $\mathbf{e}_{j\mathbf{q}}$ – собственный вектор матрицы (1.11), принадлежащий собственному значению $\omega_{j\mathbf{q}}^2$. При каждом \mathbf{q} векторы поляризации можно нормировать на единицу и, кроме того, они оказываются взаимно ортогональными:

$$\mathbf{e}_{j'\mathbf{q}}^* \cdot \mathbf{e}_{j\mathbf{q}} = \delta_{j'j}. \quad (1.12)$$

Звёздочка означает комплексное сопряжение, причём $\mathbf{e}_{j\mathbf{q}}^* = \mathbf{e}_{j,-\mathbf{q}}$. Из (1.10) – (1.11) следует, что $\omega_j(-\mathbf{q}) = \omega_j(\mathbf{q})$.

Общее решение уравнений динамики решётки имеет вид линейной комбинации частных решений с произвольными коэффициентами $c_{j\mathbf{q}}$. Собственному значению $\omega_{j\mathbf{q}}^2$ отвечают два знака частоты ($\pm \omega_{j\mathbf{q}}$, где $\omega_{j\mathbf{q}} \geq 0$), так что из комплексных частных решений образуется действительное общее решение:

$$\mathbf{u}_{\mathbf{R}}(t) = \sum_{j=1,2,3} \sum_{\mathbf{q}} \left(c_{j\mathbf{q}} \mathbf{e}_{j\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R} - i\omega_{j\mathbf{q}} t} + c_{j\mathbf{q}}^* \mathbf{e}_{j\mathbf{q}}^* e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R} + i\omega_{j\mathbf{q}} t} \right). \quad (1.13)$$

Это решение описывает движение атома в узле простой решётки \mathbf{R} в виде наложения гармонических колебаний с различными собственными частотами и собственными векторами поляризации. Собственные колебания входят в (1.13) с амплитудами и начальными фазами, произвольными в меру произвольности начальных условий; они задаются комплексными амплитудами $c_{j\mathbf{q}}$.

Собственные колебания решётки с заданными j и \mathbf{q} представляют собой вполне определённые волны смещений атомов. Эти волны выступают в качестве новых «координатных ортов», по которым совокупность векторов смещения всех атомов разлагается на «проекции» $c_{j\mathbf{q}}$ согласно (1.13). О таком разложении говорят как о переходе к нормальным координатам (на деталях определения нормальных координат мы здесь не останавливаемся), а собственные колебания решётки с заданными j и \mathbf{q} называют *нормальными модами*. Количество нормальных координат равно количеству собственных частот $\omega_j(\mathbf{q})$ и должно совпадать с числом степеней свободы решётки. Так и получается, поскольку в образце конечных размеров волновой вектор \mathbf{q} вследствие граничных условий Борна – Кармана, налагаемых на решения (1.9), принимает дискретные

значения. Неэквивалентные значения \mathbf{q} находятся внутри первой зоны Бриллюэна, и число их всегда равно количеству G элементарных ячеек в образце. В простой решётке число ячеек равно числу атомов, $G = N$, а число ветвей спектра собственных частот равно трём, так что число различных значений «номера» моды (j, \mathbf{q}) как раз равно числу атомных степеней свободы, $3N$.

Переход от смещений отдельных атомов к нормальным модам важен тем, что он резко упрощает описание колебаний решётки. Исходные уравнения динамики атомов (1.1) взаимосвязаны, поскольку сила, действующая на один атом, зависит от смещений остальных атомов. Но если вместо смещений $u_{\mathbf{R}}^k(t)$ динамику решётки описывать таким же количеством «нормальных координат» $Q_{j\mathbf{q}}(t) \equiv c_{j\mathbf{q}} \exp(-i\omega_{j\mathbf{q}}t)$, то последние оказываются независимыми друг от друга – каждая из величин $Q_{j\mathbf{q}}(t)$ удовлетворяет простому уравнению гармонического осциллятора:

$$\frac{d^2 Q_{j\mathbf{q}}}{dt^2} = -\omega_{j\mathbf{q}}^2 Q_{j\mathbf{q}}. \quad (1.14)$$

Независимость нормальных мод особенно существенна в расчёте энергии колебаний кристаллической решётки E_{latt} . В терминах атомных смещений энергия колебаний складывается из кинетической энергии атомов (выписываем выражения для случая простой решётки)

$$E_{\text{kin}} = \frac{M}{2} \sum_{\mathbf{R}} \frac{d\mathbf{u}_{\mathbf{R}}}{dt} \cdot \frac{d\mathbf{u}_{\mathbf{R}}}{dt}, \quad (1.15)$$

и энергии взаимодействия:

$$\Phi(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_N) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{R}, k} \sum_{\mathbf{R}', k'} u_{\mathbf{R}}^k V_{\mathbf{R}-\mathbf{R}'}^{kk'} u_{\mathbf{R}'}^{k'}. \quad (1.16)$$

Подстановка в (1.15)–(1.16) разложения смещений по нормальным модам (1.13) поначалу выглядит громоздко, но ответ

сильно упрощается в результате учёта свойств нормальных мод (1.10) – (1.12) и применения следующего равенства, обусловленного требованием цикличности Борна – Кармана:

$$\sum_{\mathbf{R}} e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{q}')\cdot\mathbf{R}} = G \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}, \quad (1.17)$$

где G – число элементарных ячеек в образце; в случае простой решётки $G = N$ – число атомов; \mathbf{q} и \mathbf{q}' находятся в первой зоне Бриллюэна. В итоге оказывается, что в полную энергию колебаний решётки каждая мода даёт независимый вклад, пропорциональный квадрату амплитуды колебаний, $|c_{j\mathbf{q}}|^2$ (что характерно для гармонического осциллятора):

$$E_{\text{latt}} = E_{\text{kin}} + \Phi = 2NM \sum_{j,\mathbf{q}} \omega_{j\mathbf{q}}^2 |c_{j\mathbf{q}}|^2. \quad (1.18)$$

Аналогия между колебательными модами решётки (j, \mathbf{q}) и гармоническими осцилляторами позволяет легко перейти к квантово-механическому описанию динамики решётки. Как известно из курса квантовой механики, гармонический осциллятор с собственной частотой ω_0 обладает дискретным энергетическим спектром $E_n = \hbar\omega_0 n + \hbar\omega_0/2$, где $n = 0, 1, 2, \dots$. Следовательно, энергия нормальной моды с частотой $\omega_j(\mathbf{q})$ равна $\hbar\omega_j(\mathbf{q}) n_{j\mathbf{q}} + \hbar\omega_j(\mathbf{q})/2$, и классическое выражение для энергии решётки (1.18) заменяется квантово-механической формулой

$$E_{\text{latt}} = \sum_{j,\mathbf{q}} \hbar\omega_j(\mathbf{q}) n_{j\mathbf{q}} + E_0, \quad (1.19)$$

где $n_{j\mathbf{q}} = 0, 1, 2, \dots$. Постоянная E_0 , называемая энергией нулевых колебаний, включает вклады $\hbar\omega_j(\mathbf{q})/2$ от всех $3N$ нормальных мод.

Кроме того, в E_0 можно включить значение потенциальной энергии атомов решётки в положении равновесия Φ_0 ; другими словами, E_0 есть энергия основного (не возбуждённого) состояния решётки.

Квантовые числа $n_{j\mathbf{q}}$ в формуле (1.19) интерпретируются как числа элементарных возбуждений – *фононов* – в модах (j, \mathbf{q}) . Энергия одного фонона равна $\hbar\omega_j(\mathbf{q})$. Поскольку число фононов $n_{j\mathbf{q}}$ в одной и той же моде (j, \mathbf{q}) может быть любым $(0, 1, 2, \dots)$, фононы, как квазичастицы, являются бозонами. Фононы не имеют электрического заряда, и поэтому их количество не обязано сохраняться (так что химпотенциал фононов равен нулю). В процессах взаимодействия электронов или фотонов с колебаниями решётки числа фононов $n_{j\mathbf{q}}$ изменяются; такие процессы описываются как акты рождения и поглощения фононов. Если колебания решётки находятся в состоянии теплового равновесия, то усреднённое по тепловым флуктуациям число фононов $\langle n_{j\mathbf{q}} \rangle \equiv N(\omega_{j\mathbf{q}})$ в каждой моде даётся распределением Бозе – Эйнштейна (с нулевым химпотенциалом):

$$N(\omega_{j\mathbf{q}}) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_{j\mathbf{q}}}{k_B T}\right) - 1}. \quad (1.20)$$

Информацию о фононном спектре конкретного материала получают из эксперимента или путём решения численными методами характеристического уравнения (1.7) в рамках какой-либо модели межатомных сил. Выше был рассмотрен подход к расчету фононного спектра простой кристаллической структуры. В случае сложной решётки положение равновесия \mathbf{r}_α каждого атома определяется узлом \mathbf{R} ячейки в решётке Браве и вектором $\boldsymbol{\rho}_s$ положения атома относительно этого узла: $\mathbf{r}_\alpha = \mathbf{R} + \boldsymbol{\rho}_s$, где индекс $s = 1, \dots, n$ нумерует атомы в пределах одной элементарной ячейки, n – количество атомов, приходящихся на одну ячейку. Таким образом, роль индекса α ,

нумерующего атомы в кристалле, теперь выполняет пара \mathbf{R}, s , и вместо (1.8) – (1.9) следует записать:

$$V_{\alpha\beta}^{ik} \equiv V_{s s', \mathbf{R}-\mathbf{R}'}^{ik} \quad (1.21)$$

$$A_{s, \mathbf{R}}^k = e_{s, \mathbf{q}}^k \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}). \quad (1.22)$$

Задача (1.5) на собственные значения ω^2 и собственные векторы $\mathbf{e}_{s, \mathbf{q}}$ принимает вид:

$$\sum_{k, s'} D_{ss', \mathbf{q}}^{ik} e_{s', \mathbf{q}}^k = \omega^2 e_{s, \mathbf{q}}^i, \quad (1.23)$$

где

$$D_{ss', \mathbf{q}}^{ik} = \frac{1}{\sqrt{M_s M_{s'}}} \sum_{\mathbf{R}-\mathbf{R}'} V_{ss', \mathbf{R}-\mathbf{R}'}^{ik} \exp(i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{R}' - \mathbf{R})). \quad (1.24)$$

Матрица $\hat{D}_{\mathbf{q}}$ в задаче на собственные значения (1.23) имеет формат $3n \times 3n$. Поэтому характеристическое уравнение задачи (1.23),

$$\det(\hat{D}_{\mathbf{q}} - \omega^2 \hat{1}) = 0, \quad (1.25)$$

определяет $3n$ ветвей фононного спектра $\omega_j(\mathbf{q})$, где n – количество атомов в элементарной ячейке. В n -кратном увеличении количества ветвей фононного спектра и заключается основное отличие динамики сложной решётки от простой. С учётом этого отличия выражения (1.19) – (1.20) справедливы в обоих случаях.

Каждой собственной частоте $\omega_j(\mathbf{q})$ принадлежит $3n$ -мерный собственный вектор матрицы (1.24), то есть $3n$ -компонентный столбец, составленный из декартовых проекций n векторов поляризации $\mathbf{e}_{s, j, \mathbf{q}}$:

$$\mathbf{e}_{1,j,\mathbf{q}}, \dots, \mathbf{e}_{n,j,\mathbf{q}}, \text{ где } j=1, 2, 3, \dots, 3n. \quad (1.26)$$

Векторы поляризации (1.26) зависят от номера атома s в пределах одной элементарной ячейки, но не зависят от номера ячеек \mathbf{R} . Они определяют одинаковый для всех ячеек тип относительного движения атомов в процессе их колебания с собственной частотой $\omega_j(\mathbf{q})$. От ячейки к ячейке может изменяться только фаза колебаний $\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}$, входящая в (1.22).

Спектры собственных частот решётки имеют ряд черт, общих для всех материалов. Так, из уравнений (1.10) – (1.11) для простой решётки или из аналогичных уравнений (1.23) – (1.24) для сложной решётки следует, что каждая ветвь спектра частот является периодической функцией волнового вектора с периодами \mathbf{K} , равными векторам обратной решётки. Действительно, по определению, векторы обратной решётки \mathbf{K} удовлетворяют соотношениям $\exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{R}) = 1$ для всех векторов \mathbf{R} прямой решётки Браве. С учетом этого определения из явного выражения для матрицы $\hat{D}_{\mathbf{q}}$ видно, что она обладает свойством периодичности, $\hat{D}_{\mathbf{q}+\mathbf{K}} = \hat{D}_{\mathbf{q}}$, поэтому такое же свойство должны иметь и её собственные значения: $\omega_{j,\mathbf{q}+\mathbf{K}}^2 = \omega_{j,\mathbf{q}}^2$. Здесь проявляется то обстоятельство, что все физически неэквивалентные значения волнового вектора \mathbf{q} содержатся в пределах одного периода обратной решётки, то есть внутри одной зоны Бриллюэна.

Ещё одно важное свойство фононных спектров заключается в том, что у любой кристаллической решётки есть три ветви с частотами, обращающимися при $\mathbf{q} \rightarrow 0$ в ноль. Это легко увидеть непосредственно из уравнений динамики (1.1), рассматривая постоянное во времени и в пространстве смещение атомов $\mathbf{u}_{\alpha} = \mathbf{u} = \text{const}$. Такое смещение, очевидно, является решением уравнений (1.1), поскольку при этом в (1.1) обращаются в ноль и

левая, и правая сторона. Постоянство \mathbf{u} во времени означает, что частота такого «колебания» равна нулю, а постоянству \mathbf{u} по всему кристаллу отвечает бесконечная длина волны, $\lambda = (2\pi/q) \rightarrow \infty$, то есть $\mathbf{q} = 0$. Осталось заметить, что в 3-мерном пространстве возможны три линейно независимых смещения \mathbf{u} (например, в трёх взаимно ортогональных направлениях), поэтому именно три ветви спектра частот должны обладать свойством $\omega_j(\mathbf{q} = 0) = 0$. Эти три ветви называются *акустическими*, потому что в длинноволновом пределе им отвечает картина синфазного движения (направленного в одну и ту же сторону) всех атомов в элементарной ячейке кристалла – как при распространении звука. При большой длине волны ($\lambda \gg a$, где a – масштаб длины порядка межатомных расстояний) акустические колебания кристаллической решётки допускают описание в терминах деформации сплошной среды (см. ниже, раздел 1.3.1).

Фононный спектр частот простой решётки имеет всего три ветви, так что все они акустические. Спектр частот сложной решётки, с n атомами на ячейку, имеет $3n$ ветвей. Из них три ветви акустические, а остальные $3n - 3$ ветви называются *оптическими*. В длинноволновом пределе (при $\mathbf{q} \rightarrow 0$) оптическое колебание выглядит как движение атомов в ячейке в разных направлениях при неподвижном центре масс ячейки. Очевидно, что частота таких колебаний по порядку величины составляет $(V/M)^{1/2}$, где V – характерный масштаб силовых постоянных, M – масштаб атомной массы. Таким образом, для оптических ветвей $\omega_j(\mathbf{q} = 0) \neq 0$.

В ионных кристаллах элементарная ячейка содержит ионы с зарядами противоположного знака. Электрическое поле внешнего оптического излучения возбуждает колебания положительных и отрицательных ионов в разных направлениях, поэтому эти колебания и называются «оптическими».

Многие важные для практики полупроводниковые кристаллы характеризуются кубической симметрией решётки (принадлежат к

кубической сингонии) и содержат по два атома в элементарной ячейке; например, Ge и Si – структура типа алмаза, PbTe – структура каменной соли, GaAs – структура цинковой обманки. Все перечисленные структуры можно представить в виде двух, сдвинутых друг относительно друга, гранцентрированных решёток. Поэтому всем таким кристаллам соответствует гранцентрированная кубическая решётка Браве. Обратная решётка в этом случае является кубической объёмноцентрированной, а зона Бриллюэна имеет вид куба с отсечёнными вершинами, см. рис. 1.1.

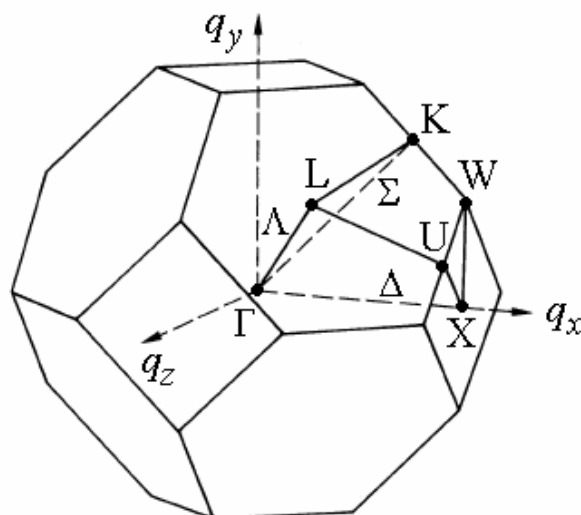


Рис. 1.1. Зона Бриллюэна в объёмноцентрированной обратной решётке с кубической симметрией.

Показаны некоторые характерные точки и направления в \mathbf{q} -пространстве. Центр зоны Бриллюэна $(0,0,0)$ – точка Γ . Значения (q_x, q_y, q_z) для точки X составляют $(2\pi/a, 0, 0)$; для точки L они равны $(\pi/a, \pi/a, \pi/a)$, где a – постоянная прямой решётки Браве. Представление о зоне Бриллюэна и обратной решётке одинаково полезно для изучения энергетического спектра электронов и фононного спектра частот

Фононные спектры в каждом из указанных выше материалов состоят из шести ветвей $\omega_j(\mathbf{q})$ – трёх акустических (А) и трёх оптических (О). Для волнового вектора, параллельного направлениям высокой симметрии (типа (100) или (111)), колебания решётки

классифицируются на продольные (L, longitudinal) и поперечные (T, transverse). В продольной моде атомы колеблются параллельно направлению распространения волны, то есть векторы поляризации волны $\mathbf{e}_{s,j,\mathbf{q}}$ параллельны волновому вектору \mathbf{q} . В поперечной моде векторы $\mathbf{e}_{s,j,\mathbf{q}}$ и \mathbf{q} перпендикулярны. Как среди акустических, так и среди оптических ветвей одна из них – продольная, а две – поперечные. При высокой симметрии направления \mathbf{q} частоты поперечных мод одного и того же типа (ТА или ТО) совпадают – двукратно вырождены. В несимметричных направлениях вырождение поперечных ветвей снимается, а классификация колебаний на «продольные» и «поперечные» приобретает условный характер, так как углы между векторами $\mathbf{e}_{s,j,\mathbf{q}}$ и \mathbf{q} отклоняются от значений, кратных $\pi/2$. Примеры зависимости частоты фононов от волнового вектора приведены на рис. 1.2, 1.3.

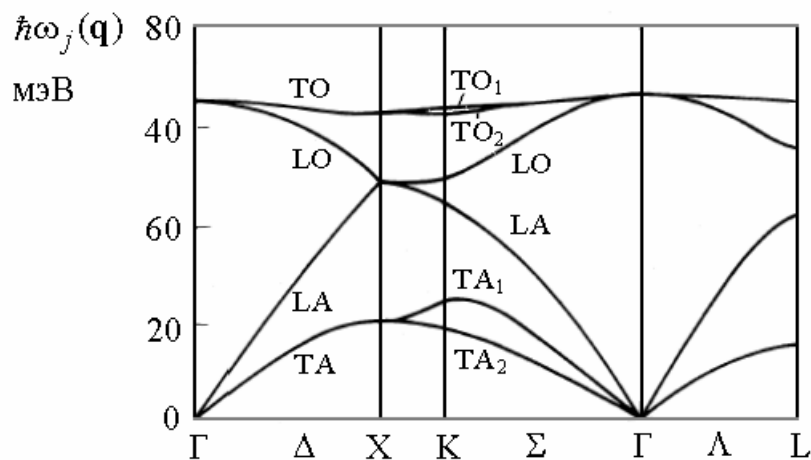


Рис. 1.2. Фононные ветви в Si.

Показана зависимость энергии фононов от величины волнового вектора q при различных направлениях \mathbf{q} (рис. из Bergmann-Schaefer, *Lehrbuch der Experimentalphysik*, Bd. 6 *Festkörperphysik* (1992); Abb.1.19)

На рис. 1.2, 1.3 хорошо видно, что два типа фононов, акустические и оптические, отчётливо различаются. Частота

акустических фононов равна нулю в центре зоны Бриллюэна (точка Γ) и увеличивается к ее границе (точки X, L, K); оптические же фононы имеют во всей зоне Бриллюэна высокую частоту, слабо зависящую от волнового вектора.

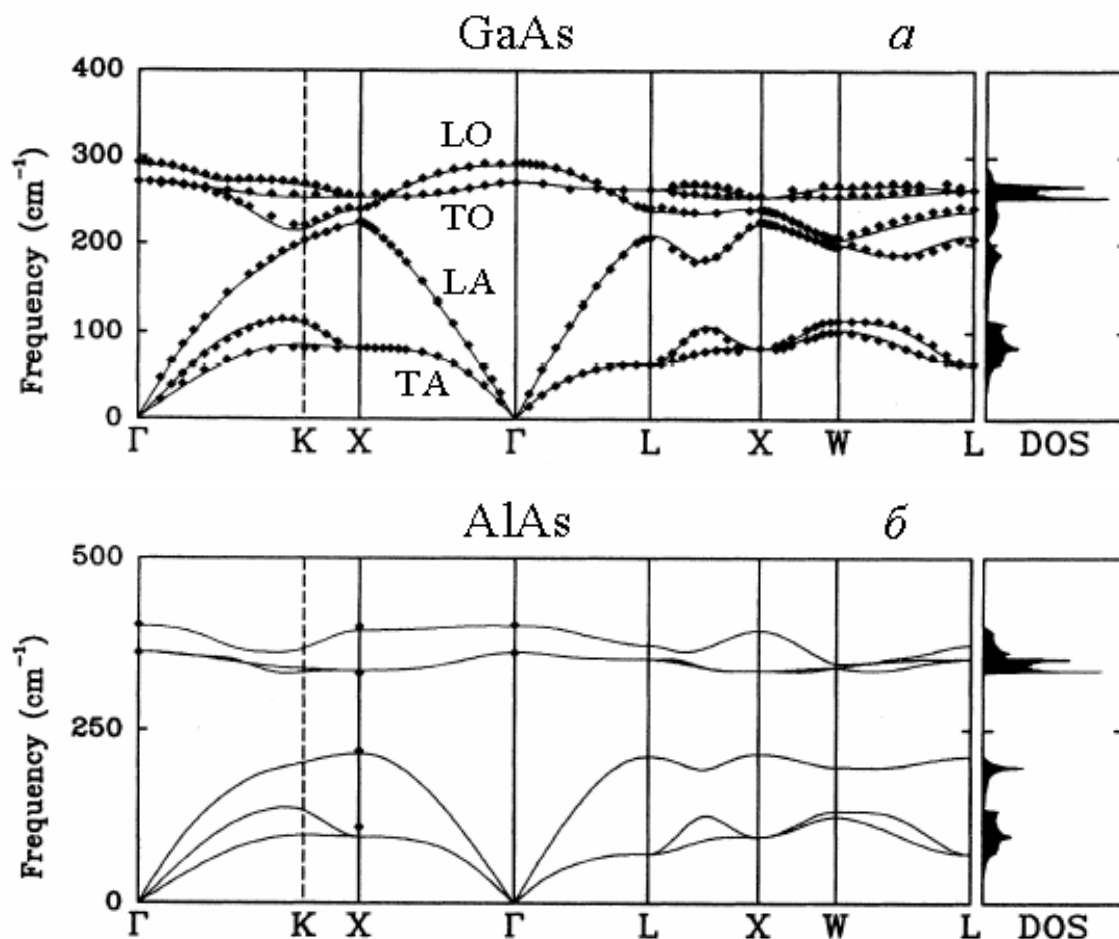


Рис. 1.3. Фононный спектр частот в GaAs и AlAs.

Данные из работы *P. Giannozzi et al / Phys. Rev. B – 1991. – Vol. 43. – P. 7231–7242*. Справа показана плотность фононных состояний (DOS)

Фононные спектры в различных кристаллах, как мы уже отмечали, количественно отличаются. Для примера на рис. 1.3 приведены спектры фононов в кристаллах GaAs и AlAs. Указанная пара полупроводников или твердых растворов на их основе часто используется для создания гетероструктур.

1.3. ФОНЫ В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ

Можно выделить несколько типов гетероструктур, в которых представляет интерес рассмотреть особенности поведения колебаний решетки. Это два полубесконечных полупроводника, разделенные гетеропереходом (рис. 1.4, а), трехслойная структура (двойная гетероструктура), образующая квантовую яму (рис. 1.4, б), и периодическая структура, образующая сверхрешетку (рис. 1.4, в).

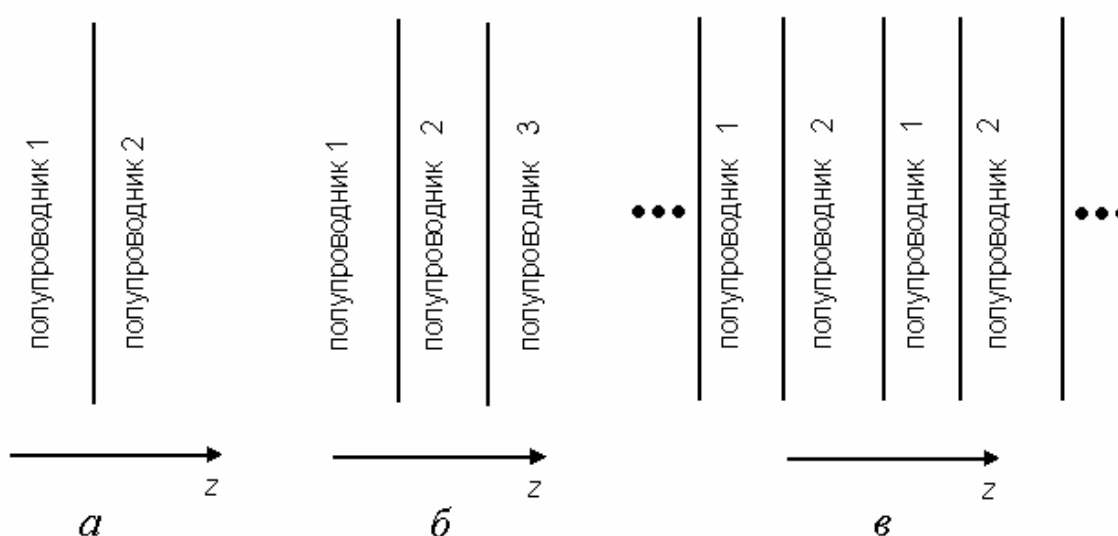


Рис. 1.4. Схемы трех типов структур, отличающихся условиями распространения волн колебаний решетки

Рассмотрим по отдельности акустические и оптические фононы в гетероструктурах, следуя методу изложения в книге [2].

1.3.1. Акустические фононы в длинноволновом приближении

Наименее сложная задача – рассмотреть акустические колебания решетки в длинноволновом приближении, $q \ll 1/a$. В этом случае применимо приближение теории упругости, в котором вещество представляется сплошной средой (в общем случае анизотропной) с определёнными значениями плотности массы ρ и упругих

постоянных C_{iklm} (см. [3]). Колебания элементов среды описываются не дискретным множеством векторов атомных смещений $\mathbf{u}_{\mathbf{R}}(t)$, а непрерывным векторным полем смещений $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$, где \mathbf{r} – радиус-вектор элемента среды. Роль сил, вызывающих колебания, играют производные по координатам от тензора упругих напряжений $s_{ik} = \sum_{lm} C_{iklm} u_{lm}$; здесь $u_{lm} = (1/2)(\partial u_l / \partial x_m + \partial u_m / \partial x_l)$ – тензор деформации. В результате, уравнения динамики атомов (1.1) заменяются «волновым уравнением» для векторного поля $u_i(\mathbf{r}, t)$:

$$\rho \frac{\partial^2 u_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t^2} = \sum_{k,l,m} C_{iklm} \frac{\partial^2 u_m(\mathbf{r}, t)}{\partial x_k \partial x_l}, \quad i = x, y, z. \quad (1.27)$$

Если частные решения этого уравнения искать в виде плоских волн,

$$u_i(\mathbf{r}, t) = A_i e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r} - i\omega t}, \quad (1.28)$$

то для компонент A_i амплитудного вектора волны из (1.27) получим систему алгебраических уравнений:

$$\omega^2 A_i = \frac{1}{\rho} \sum_{k,l,m} C_{iklm} q_k q_l A_m. \quad (1.29)$$

Очевидно, это есть задача на собственные значения ω^2 и собственные векторы \mathbf{A} матрицы 3×3 вида

$$D_{\mathbf{q}}^{ik} = \frac{1}{\rho} \sum_{l,m} C_{ilmk} q_l q_m. \quad (1.30)$$

Для того чтобы система (1.29) имела нетривиальные решения, $\mathbf{A} \neq 0$, частота ω и волновой вектор \mathbf{q} должны удовлетворять характеристическому уравнению третьей степени относительно ω^2 :

$$\det \left(D_{\mathbf{q}}^{ik} - \omega^2 \delta_{ik} \right) = 0. \quad (1.31)$$

Это уравнение имеет три решения; они определяют три ветви $\omega_j(\mathbf{q})$ спектра собственных частот упругой среды. Из (1.30) видно, что $D_{\mathbf{q}}^{ik} \rightarrow 0$ при $\mathbf{q} \rightarrow 0$; следовательно, $\omega_j(\mathbf{q}=0) = 0$, то есть эти три ветви являются акустическими. Одна из них – продольная (LA), а две другие – поперечные (TA).

Так как матрица (1.30) зависит от \mathbf{q} квадратично и определяет квадрат собственной частоты, то закон дисперсии для акустических мод в длинноволновом приближении оказывается линейным:

$$\omega_l(q) = s_l q, \quad \omega_{t1}(q) = s_{t1} q, \quad \omega_{t2}(q) = s_{t2} q, \quad (1.32)$$

где коэффициенты s_l и s_{t1}, s_{t2} имеют смысл скорости продольных и поперечных акустических волн, соответственно. Эти скорости волн в кристалле зависят от направления волнового вектора \mathbf{q} относительно кристаллографических осей. Для симметричных направлений две поперечные ветви спектра частот вырождены и поэтому характеризуются одним значением s_t . Величины s_l и s_t можно считать не зависящими от направления волнового вектора только в пренебрежении анизотропией, когда рассматривается не кристалл, а изотропная среда.

Поскольку многие полупроводниковые кристаллы принадлежат кубической сингонии, рассмотрим этот случай подробнее. Для кубического кристалла тензор упругих постоянных имеет три независимых компоненты (а для изотропной среды и того меньше –

две). Декартовы оси x , y , z удобно выбирать вдоль направлений (100), (010), (001) кубической решётки, поскольку в этом случае отличны от нуля только следующие компоненты тензора упругих постоянных:

$$\begin{aligned}
C_{xxxx} &= C_{yyyy} = C_{zzzz} \equiv C_{11}, \\
C_{xxyy} &= C_{yyzz} = C_{zzxx} = C_{yuyx} = C_{zzyy} = C_{xxzz} \equiv C_{12}, \\
C_{xyxy} &= C_{yzyz} = C_{zxzx} = C_{yxyx} = C_{zyzy} = C_{xzxz} = \\
&= C_{xyyx} = C_{yzzy} = C_{zxxz} = C_{yxxy} = C_{zyyz} = C_{xzzx} \equiv C_{44}.
\end{aligned} \tag{1.33}$$

Рассмотрим для объёмного кристалла волну продольных колебаний, распространяющуюся в направлении (001); это направление является осью симметрии кристалла, так что результат будет очень простым (здесь и далее речь идёт о кристаллах кубической сингонии). У вектора смещений (1.28) в данном случае отлична от нуля лишь одна составляющая:

$$u_z(\mathbf{r}, t) = A_z e^{iqz - i\omega t} = u_z(z, t). \tag{1.34}$$

Поскольку $q_x = 0$, $q_y = 0$, $q_z = q$, уравнение (1.29) принимает вид

$$\left(\omega^2 - \frac{C_{11}}{\rho} q^2 \right) A_z = 0. \tag{1.35}$$

Отсюда следует, что решение в виде продольной волны (1.34) имеет место (то есть $A_z \neq 0$), если $\omega = (C_{11}/\rho)^{1/2} q$, так что скорость продольного звука в этом примере $s_l = (C_{11}/\rho)^{1/2}$. Аналогично выясняется, что скорость поперечных волн $s_{t1} = s_{t2} = (C_{44}/\rho)^{1/2}$; всё это ясно также из того, что динамическая матрица (1.30) в указанных

выше координатах при выборе $\mathbf{q} \parallel (001)$ принимает диагональный вид:

$$\hat{D}_{\mathbf{q}} = \frac{q^2}{\rho} \begin{pmatrix} C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & C_{11} \end{pmatrix}. \quad (1.36)$$

При рассмотрении гетероперехода (рис. 1.4, *a*) существенен тот факт, что параметры ρ и C_{iklm} в полупроводниках А и В, составляющих гетероструктуру А / В, отличаются. Пусть границей между материалами А и В является плоскость $z = 0$. Тогда ρ и C_{iklm} – кусочно-постоянные функции координаты z , и нам следует вернуться к координатному представлению – к волновому уравнению (1.27). Оно содержит вторые производные поля $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ по координатам, и для существования этих производных компоненты поля $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ следует подчинить условию непрерывности, которое будет служить граничным условием в окрестности интерфейса А / В :

$$\mathbf{u}|_A = \mathbf{u}|_B. \quad (1.37)$$

Ещё одно граничное условие связано с условием непрерывности z -компонент тензора напряжений:

$$s_{iz}|_A = s_{iz}|_B, \quad i = x, y, z. \quad (1.38)$$

Граница раздела А / В, перпендикулярная оси z , нарушает трансляционную симметрию среды в направлении z , поэтому решения волнового уравнения (1.27) не будут иметь вида плоской волны $\exp(iqz)$. Зависимость решений от z даётся более сложной функцией $u(z)$. Например, она может представлять собой линейную комбинацию двух плоских волн $\exp(\pm iqz)$ в каждом из слоёв А и В, если слои однородны.

В качестве самого простого примера рассмотрим продольную волну, параллельную оси z :

$$u_x \equiv 0, \quad u_y \equiv 0, \quad u_z(z, t) = u(z)e^{-i\omega t}. \quad (1.39)$$

В этом случае правая сторона волнового уравнения (1.27) с учётом (1.33) равна $C_{zzzz}d^2u/dz^2 = C_{11}d^2u/dz^2$, и уравнение принимает вид

$$\frac{d^2u(z)}{dz^2} = -\frac{\omega^2}{s_l^2}u(z). \quad (1.40)$$

Его решение можно представить в форме:

$$u(z) = \begin{cases} A_1 \exp(iq_1 z) + B_1 \exp(-iq_1 z), & z < 0, \\ A_2 \exp(iq_2 z) + B_2 \exp(-iq_2 z), & z > 0, \end{cases} \quad (1.41)$$

где $q_n = \omega/s_n$, n – номер слоя (так что здесь s_n – скорость продольной волны в n -ом слое), A_n и B_n – произвольные коэффициенты, которые следует выбирать так, чтобы удовлетворялись граничные условия (1.37) – (1.38).

Тензор деформации, соответствующий векторному полю смещений (1.39), имеет единственную отличную от нуля компоненту: $u_{zz} = \partial u_z / \partial z$. Поэтому, с учётом (1.33), среди компонент s_{iz} тензора напряжений не равна нулю лишь $s_{zz} = C_{11}u_{zz}$. Мы видим, что граничные условия (1.37) – (1.38) для решения (1.39) сводятся к следующим условиям непрерывности:

$$u \Big|_1 = u \Big|_2, \quad \Lambda_1 \frac{du}{dz} \Big|_1 = \Lambda_2 \frac{du}{dz} \Big|_2, \quad (1.42)$$

где через Λ_n обозначена упругая постоянная C_{11} в слое n . Отсюда следуют два соотношения, связывающих четыре коэффициента A_n и B_n в (1.41):

$$A_1 + B_1 = A_2 + B_2, \quad iq_1\Lambda_1(A_1 - B_1) = iq_2\Lambda_2(A_2 - B_2). \quad (1.43)$$

Решение (1.41) и соотношения (1.43) формально совпадают с хорошо известным решением для волновой функции электрона $\psi(z)$, движущегося вдоль нормали к границе двух слоев полупроводников: если волновые векторы k_1, k_2 электрона в слоях 1 и 2 заменить на q_1, q_2 , а значения обратных эффективных масс m_1^{-1}, m_2^{-1} заменить упругими постоянными Λ_1, Λ_2 , то решение одномерного уравнения Шредингера переходит в написанное здесь решение для акустической волны. Отметим, что такая же замена позволяет легко получить дисперсионное уравнение для акустической волны в сверхрешётке (см. ниже) из дисперсионного уравнения для электронных минизон в надбарьерной области. Физический смысл указанных решений уравнения Шредингера, как известно, сводится к картине частичного отражения электронной «волны де Бройля» при распространении через гетеропереход. Аналогичную интерпретацию имеет и полученное здесь решение для продольной акустической волны: с какой бы стороны на границу А/В ни падала исходная волна, наличие границы приводит к появлению волн $\exp(\pm iq_n z)$, распространяющихся в противоположных направлениях.

В отличие от скалярной волновой функции электрона $\psi(z)$ поле смещений среды \mathbf{u} – векторное; оно имеет три компоненты. Поэтому полное исследование различных случаев распространения волн $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ через гетеропереход оказывается довольно сложным и, конечно же, не исчерпывается рассмотренным примером. Как и в задачах волновой оптики, физическая картина здесь существенно зависит от направления колебаний \mathbf{u} и волнового вектора \mathbf{q} по отношению к

плоскости интерфейса А / В. Большинство решений волнового уравнения описывает частичное отражение и преломление акустических волн на границе А / В, что связано с различными скоростями этих волн по обе стороны от гетерограницы. Если \mathbf{q} направлен по нормали к границе, то «преломление» проявляется просто в различии длин волн с одной и той же частотой ω в 1-ом и 2-ом слоях: $\lambda_n = 2\pi/q_n = 2\pi s_n / \omega$.

В качестве ещё одного примера рассмотрим поперечную волну, движущуюся параллельно оси z :

$$u_x(z, t) = u(z)e^{-i\omega t}, \quad u_y \equiv 0, \quad u_z \equiv 0. \quad (1.44)$$

Правая сторона волнового уравнения (1.27) с учётом (1.33) теперь равна $C_{xzzx}d^2u/dz^2 = C_{44}d^2u/dz^2$. Потому волновое уравнение имеет вид, аналогичный (1.40), но с заменой скорости продольного звука s_l на скорость поперечных акустических волн s_t . С такой заменой все результаты (1.41)–(1.43) остаются в силе, причём Λ_n в слое n теперь означает упругую постоянную C_{44} , а не C_{11} .

Наличие гетерограницы приводит и к более сложным решениям, которые в однородном (объёмном) кристалле отсутствуют. Например, рассмотрим поперечную волну \mathbf{u} , движущуюся параллельно плоскости интерфейса (вдоль оси x), и поляризованную перпендикулярно этой плоскости (вдоль оси z):

$$u_z(x, z, t) = u(z)e^{iq_x x - i\omega t}. \quad (1.45)$$

В этом случае в правой стороне волнового уравнения (1.27) будут отличны от нуля уже несколько слагаемых, включая члены

$$C_{xxzz} \frac{\partial^2 u_z}{\partial x \partial z} + C_{xzxz} \frac{\partial^2 u_z}{\partial z \partial x}. \quad (1.46)$$

Этим членам соответствует не равная нулю левая часть волнового уравнения (1.27) вида $\rho \partial^2 u_x / \partial t^2$. Следовательно, поперечная волна (1.45) обязательно возбуждает ещё и продольную волну u_x (и наоборот):

$$u_x(x, z, t) = v(z) e^{iq_x x - i\omega t}. \quad (1.47)$$

Волновое уравнение (1.27) в этом примере сводится к системе двух взаимосвязанных уравнений для пары неизвестных функций $u(z)$, $v(z)$. Граничные условия (1.37)–(1.38) также дают относительно сложную систему уравнений для функций $u(z)$, $v(z)$ и их производных. Оказывается, что для определенных соотношений упругих постоянных в этой ситуации появляется новый тип решений – *интерфейсные моды*. Это колебания, локализованные вблизи гетерограницы и способные распространяться только вдоль нее. Амплитуды этих колебаний убывают при удалении от гетероперехода. Интерфейсные моды аналогичны поверхностным волнам, которые, как известно, могут распространяться вблизи поверхности упругой среды, не проникая в глубь неё [3].

Теперь обсудим поведение акустических мод в структуре с квантовой ямой (рис. 1.4, б). Ограничимся случаем, когда слои 1 и 3 образованы одним и тем же материалом.

Наряду с обычными модами, описывающими частичное отражение и преломление звуковых волн на интерфейсах трёхслойной системы, здесь могут существовать локализованные состояния фононов, аналогичные размерно-квантованным состояниям электронов в квантовой яме. В таких состояниях фононы распространяются вдоль квантовой ямы, не выходя далеко за её

пределы. Чтобы убедиться в этом, рассмотрим поперечную акустическую волну, движущуюся параллельно плоскости интерфейсов (вдоль оси x) и поляризованную параллельно этой плоскости (вдоль оси y):

$$u_x \equiv 0, \quad u_y(x, z, t) = u(z) e^{iq_x x - i\omega t}, \quad u_z \equiv 0. \quad (1.48)$$

Такая волна вполне может существовать как самостоятельная мода, поскольку при подстановке (1.48) в правую часть волнового уравнения (1.27) не возникает ненулевых слагаемых с индексом i , отличным от y , то есть колебания вдоль осей x и z не возбуждаются. Уравнение (1.27) для волны (1.48) имеет вид:

$$\rho \frac{\partial^2 u_y}{\partial t^2} = C_{yxxx} \frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} + C_{yzyz} \frac{\partial^2 u_y}{\partial z^2}. \quad (1.49)$$

С учётом явного выражения (1.48) для $u_y(x, z, t)$ это уравнение можно записать в форме уравнения для неизвестной функции $u(z)$,

$$-\frac{d^2 u}{dz^2} + \left(-\frac{\omega^2}{s^2} \right) u = -q_x^2 u, \quad (1.50)$$

где $s = s_t(z)$ – скорость поперечной звуковой волны, различная в материалах 1 и 2.

Сравним (1.50) с хорошо известным уравнением Шредингера для волновой функции $\psi(z)$ электрона в квантовой яме с рельефом дна зоны проводимости $U(z)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dz^2} + U(z) \psi = E \psi. \quad (1.51)$$

Здесь форма ступенчатого потенциала $U(z)$ считается заданной, а уровни энергии E ищутся как собственные значения задачи (1.51). Известно, что в симметричной квантовой яме найдётся по меньшей мере один дискретный уровень. В достаточно глубокой яме существуют несколько дискретных уровней E_k . На шкале энергии уровни E_k располагаются между дном ямы и потолком потенциальных барьеров. Каждому уровню E_k принадлежит локализованное состояние с волновой функцией $\psi_k(z)$, убывающей в глубь потенциальных барьеров слева и справа от ямы.

Видно, что уравнения (1.51) и (1.50) подобны, а значит, их решения должны быть сходными. В уравнении (1.50) заданной величиной считается частота ω , одна и та же для каждого слоя структуры, и скорость звука s в каждом слое, то есть задаётся рельеф «потенциала» $-\omega^2/s^2$. Ищутся собственные значения «энергии» $-q_x^2$ и принадлежащие им собственные функции $u(z)$. Если скорость акустических волн s_2 в центральном слое структуры меньше скорости s_1 в прилегающих слоях, $s_2 < s_1$, то потенциал $-\omega^2/s^2(z)$ имеет вид ямы. Тогда в области ямы должна существовать по меньшей мере одна локализованная волна. Частота колебаний и волновой вектор такой локализованной волны удовлетворяют условию

$$\frac{\omega}{s_2} > q > \frac{\omega}{s_1}. \quad (1.52)$$

Локализация акустической волны иллюстрируется на рис. 1.5. Она будет тем сильнее, чем больше глубина «потенциальной ямы» для фононов, то есть чем больший разрыв W на границах претерпевает величина $-\omega^2/s^2(z)$:

$$W = \omega^2 \left(\frac{1}{s_2^2} - \frac{1}{s_1^2} \right). \quad (1.53)$$

Отличием от размерного квантования электронов здесь является зависимость глубины ямы (1.53) от частоты волны ω , а значит и от волнового вектора q_x . Это означает, что высокочастотные (коротковолновые) моды будут сильнее локализоваться в центральной области структуры по сравнению с низкочастотными (длинноволновыми) модами, как показано на рис 1.5. Локализация фононов в квантовой яме возможна и для более сложных мод, представляющих собой совместные колебания (1.45) и (1.47).

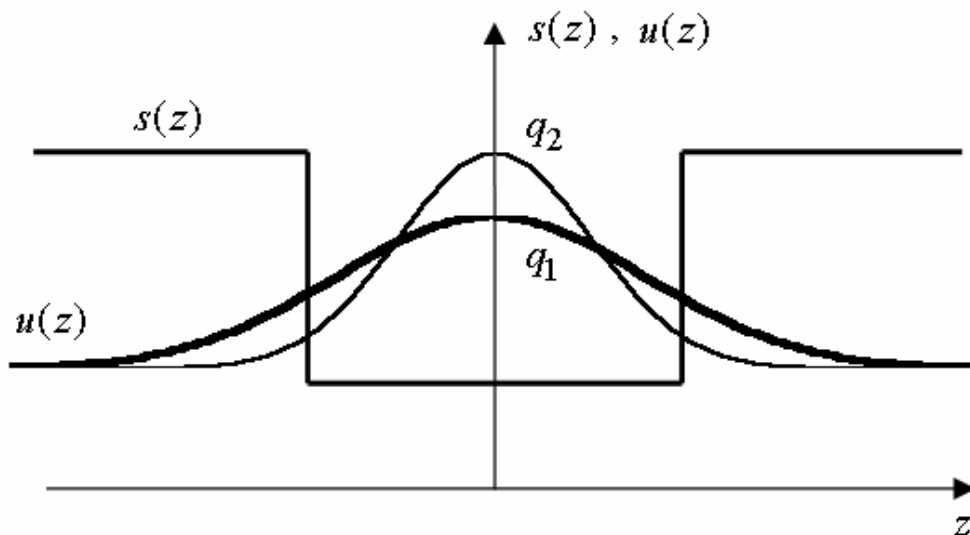


Рис. 1.5. Профиль скорости звука $s(z)$ и амплитуды локализованной акустической волны $u(z)$ в структуре с квантовой ямой (схематично). Графики функции $u(z)$ показаны для двух значений ($q_1 < q_2$) волнового вектора q_x , которые соответствуют двум разным значениям частоты

Обратимся теперь к акустическим волнам в сверхрешетках (рис. 1.6). Ограничимся рассмотрением продольной волны, распространяющейся в направлении оси роста структуры z , то есть перпендикулярно плоскости ее интерфейсов.

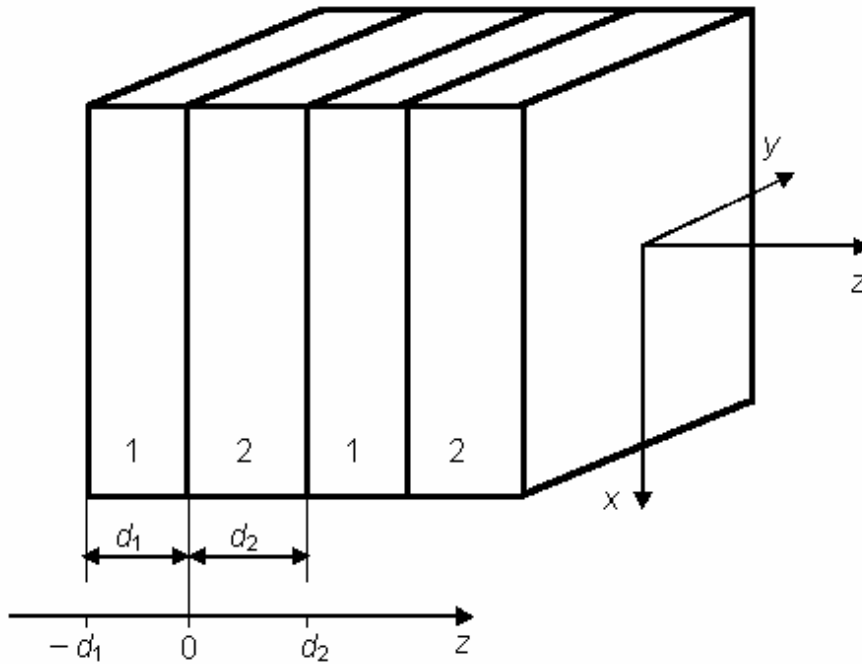


Рис. 1.6. Сверхрешетка, образованная слоями материалов 1 и 2 с толщинами d_1 и d_2 . Показано два периода сверхрешетки

Такая волна описывается векторным полем (1.39)

$$u_x \equiv 0, \quad u_y \equiv 0, \quad u_z(z, t) = u(z)e^{-i\omega t}.$$

Здесь функция $u(z)$ должна быть решением уравнения (1.40), в котором скорость продольной волны $s \equiv s_l(z)$ в слоях 1 и 2 принимает значения s_1 и s_2 . Для одного периода сверхрешётки решение запишется аналогично (1.41):

$$u(z) = \begin{cases} A_1 \exp(iq_1 z) + B_1 \exp(-iq_1 z), & -d_1 < z < 0, \\ A_2 \exp(iq_2 z) + B_2 \exp(-iq_2 z), & 0 < z < d_2, \end{cases} \quad (1.54)$$

где $q_1 = \omega / s_1$ и $q_2 = \omega / s_2$.

Наряду с условиями сшивания (1.42) в точке $z = 0$,

$$u \Big|_1 = u \Big|_2, \quad \Lambda_1 \frac{du}{dz} \Big|_1 = \Lambda_2 \frac{du}{dz} \Big|_2, \quad (1.55)$$

которые дают два уравнения для четырёх неопределённых коэффициентов A_1, B_1, A_2, B_2 , такие же условия (1.55) должны выполняться на каждой границе между слоями сверхрешётки, в том числе в точке $z = -d_1$. В этой точке функция (1.54) и её производная сшиваются с аналогичной функцией и производной из интервала $-d_1 - d < z < -d_1$. Однако, эту новую пару условий можно представить и в другом виде – как сшивание значений функции (1.54) и её производной на разных концах одного и того же периода сверхрешётки с учётом фазового множителя Блоха. Дело в том, что решение $u(z)$ в периодической структуре, как известно, должно подчиняться теореме Блоха:

$$u(z - d) = e^{-iqd} u(z), \quad (1.56)$$

где $d = d_1 + d_2$ – период сверхрешётки, q – квазиволновой вектор волны $u(z)$ в сверхрешётке (его не следует смешивать с величинами $q_{1,2} = \omega/s_{1,2}$, относящимися к отдельным слоям). Подставив в (1.56) $z = d_2 - 0$, выражаем значение функции $u(z)$ в точке $z = -d_1 - 0$ через значение в точке $z = d_2 - 0$ и аналогично поступаем со значениями производной. Тогда условия сшивания в точке $z = -d_1$ примут вид:

$$u \Big|_{z=-d_1} = e^{-iqd} u \Big|_{z=d_2}, \quad \Lambda_1 \frac{du}{dz} \Big|_{z=-d_1} = \Lambda_2 e^{-iqd} \frac{du}{dz} \Big|_{z=d_2}. \quad (1.57)$$

Граничные условия (1.55) и (1.57) составляют систему четырёх линейных однородных уравнений для неизвестных A_1, B_1, A_2, B_2 . Чтобы она имела ненулевое решение, необходимо приравнять нулю определитель матрицы 4×4 , составленной из коэффициентов

системы. Здесь мы не будем выписывать ни эту систему, ни громоздкое выражение для её определителя. Подчеркнём только, что после преобразований указанное условие обращения определителя в ноль принимает вид трансцендентного уравнения для частоты волны ω (это же уравнение проще выводится методом матриц переноса, описанным в [5] или в первой части нашего пособия):

$$\cos qd = \cos \frac{\omega d_1}{s_1} \cos \frac{\omega d_2}{s_2} - \frac{1}{2} \left(\frac{\rho_2 s_2}{\rho_1 s_1} + \frac{\rho_1 s_1}{\rho_2 s_2} \right) \sin \frac{\omega d_1}{s_1} \sin \frac{\omega d_2}{s_2}. \quad (1.58)$$

Здесь учтено, что $s_n = (\Lambda_n / \rho_n)^{1/2}$, где Λ_n – модуль упругости, ρ_n – плотность материала в n -ом слое. Уравнение (1.58) имеет смысл дисперсионного уравнения, которым определяется зависимость частоты $\omega(q)$ акустической волны в сверхрешётке от волнового вектора q .

Решение $u(z)$, удовлетворяющее теореме Блоха (1.56), должно иметь форму

$$u(z) = e^{iqz} u_q(z), \quad (1.59)$$

где $u_q(z)$ – периодическая функция с периодом сверхрешётки: $u_q(z + d) = u_q(z)$. С учётом этого факта окончательное выражение для волны (1.39) в сверхрешётке запишется в виде:

$$u_x \equiv 0, \quad u_y \equiv 0, \quad u_z(z, t) = u_q(z) e^{iqz - i\omega(q)t}. \quad (1.60)$$

Обсудим характер решений дисперсионного уравнения (1.58). Прежде всего отметим, что все физически неэквивалентные решения должны содержаться в конечном интервале значений квазиволнового вектора q ; этот интервал называется первой зоной Бриллюэна сверхрешетки:

$$-\frac{\pi}{d} < q < \frac{\pi}{d}. \quad (1.61)$$

Зона Бриллюэна для сверхрешетки существенно меньше зоны Бриллюэна обычной кристаллической решетки, поскольку $d \gg a$, где a – период обычной решётки (a – величина порядка линейных размеров атома).

Введём параметр, характеризующий различие упругих свойств слоев, составляющих сверхрешетку:

$$\eta = \frac{\rho_2 s_2 - \rho_1 s_1}{\sqrt{\rho_1 \rho_2 s_1 s_2}}. \quad (1.62)$$

Тогда (1.58) можно записать в виде:

$$\cos qd = \cos \left[\omega \left(\frac{d_1}{s_1} + \frac{d_2}{s_2} \right) \right] - \frac{\eta^2}{2} \sin \frac{\omega d_1}{s_1} \sin \frac{\omega d_2}{s_2}. \quad (1.63)$$

Для наиболее часто встречающихся сверхрешеток параметр η отличен от нуля, однако сравнительно мал, и поэтому в (1.63) можно в низшем приближении пренебречь членом, пропорциональным η^2 . В этом приближении дисперсионное уравнение принимает вид:

$$\cos qd = \cos \left[\omega \left(\frac{d_1}{s_1} + \frac{d_2}{s_2} \right) \right]. \quad (1.64)$$

Запишем решение уравнения (1.64) в форме зависимости квазиволнового вектора q от частоты волны ω :

$$q = \pm \frac{\omega}{d} \left(\frac{d_1}{s_1} + \frac{d_2}{s_2} \right) + \frac{2\pi n}{d}, \quad (1.65)$$

где n – любое целое число. Видно, что величины $2\pi n/d$ играют роль векторов «обратной решётки» для сверхрешётки, а квазиволновой вектор q определён, как и должно быть, с точностью до слагаемого, равного любому вектору обратной решётки. Первой зоне Бриллюэна сверхрешётки соответствует $n = 0$. Закон дисперсии $\omega(q)$ достаточно рассматривать только в пределах первой зоны Бриллюэна.

Если ввести представление о среде с усреднённой по слоям сверхрешётки скоростью звука S , определяемой по формуле

$$\frac{d}{S} = \frac{d_1}{s_1} + \frac{d_2}{s_2}, \quad (1.66)$$

то закон дисперсии (1.65) запишется в виде $\omega(q) = Sq$. Графически этот закон дисперсии может быть представлен прямой линией, «сложенной» таким образом, чтобы привести ее к первой зоне Бриллюэна сверхрешётки, как это показано на рис. 1.7.

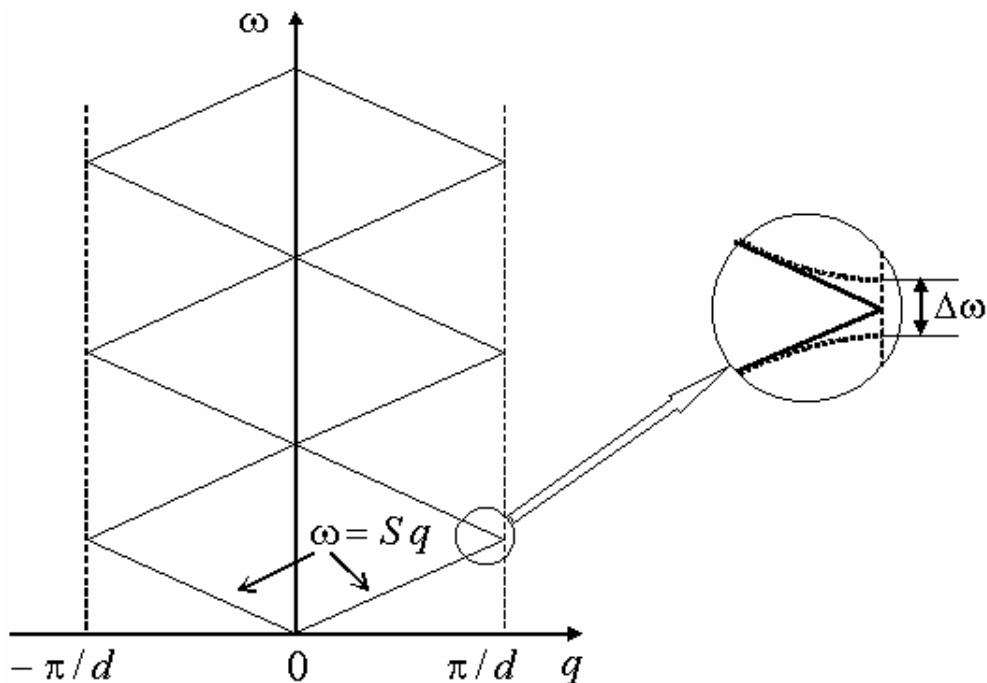


Рис. 1.7. Спектр «сложенных» акустических фононов в сверхрешетке.
На вставке показано образование запрещенных зон

Полученный спектр состоит из набора соприкасающихся разрешенных минизон. Запрещенные минизоны отсутствуют. Соприкосновение минизон в центре и на границах зоны Бриллюэна можно рассматривать как вырождение различных ветвей спектра частот, обусловленное пренебрежением слагаемым с параметром η^2 . Теперь учтём в (1.63) малый член, пропорциональный η^2 . Тогда вырождение будет снято, то есть дисперсионные кривые в точках вырождения расщепятся, и появятся запрещенные минизоны (см. вставку на рис. 1.7).

Величина расщепления $\Delta\omega$ зависит от номера ветви (номера минизоны). Для ширины первой запрещенной минизоны имеем:

$$\Delta\omega \approx 2\eta \frac{S}{d} \sin\left(\pi \frac{d_1 s_2 - d_2 s_1}{d_1 s_2 + d_2 s_1}\right). \quad (1.67)$$

Таким образом, в спектре акустических волн сверхрешетки появляются интервалы частот, в которых волны не могут в ней распространяться. Так, если встроить сверхрешетку в какую-либо среду, то акустические волны с частотами, соответствующими разрешенным минизонам, будут проходить через сверхрешетку с ненулевым коэффициентом прохождения. Если же частота волны попадает в запрещенную минизону, то коэффициент прохождения такой акустической волны оказывается близким к нулю, падающая волна будет полностью отражаться от сверхрешетки.

1.3.2. Коротковолновые акустические и оптические фононы

Детальное рассмотрение коротковолновых колебаний требует численных расчетов. Для простоты ограничимся замечаниями качественного характера на примере двойной гетероструктуры (рис. 1.4 , б), как и выше, следуя [2].

Пусть плоскости интерфейсов между материалами 1 и 2 с кубической симметрией перпендикулярны оси z , которая, в свою очередь, параллельна одной из кристаллографических осей, например, (001). Рассматриваем распространение волны колебаний вдоль оси z : $q_x = 0$, $q_y = 0$, $q_z \neq 0$. В этом случае наличие интерфейсов не приводит к связи поперечных и продольных колебаний решетки друг с другом.

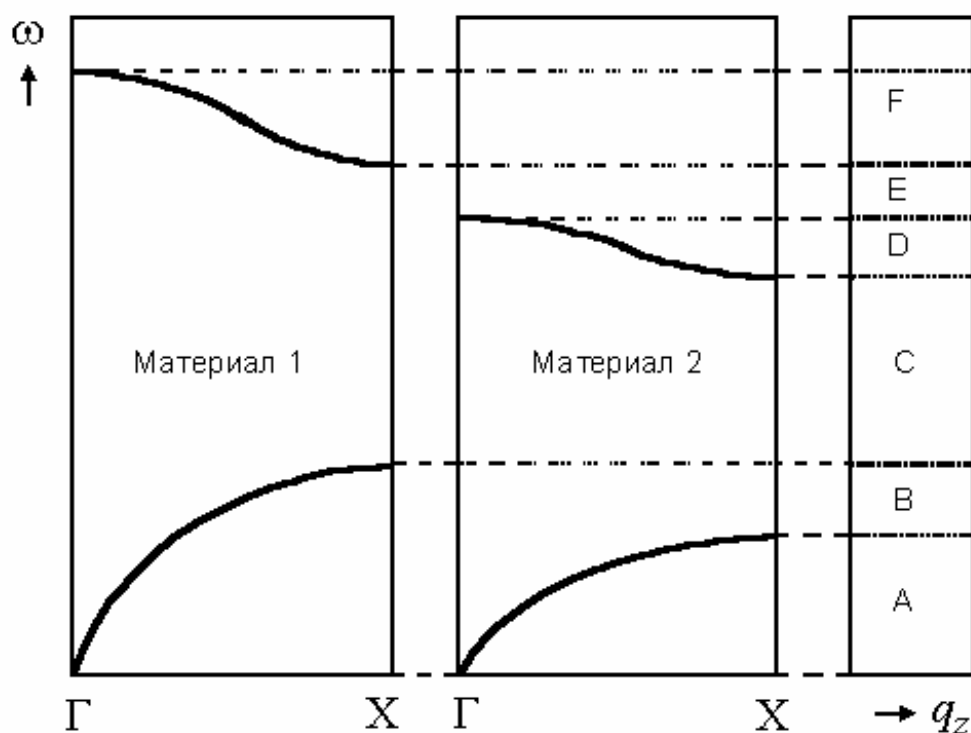


Рис. 1.8. Диаграмма фононных частот в материалах 1 и 2

На рис. 1.8 схематично изображены дисперсионные кривые для ветвей частотного спектра колебаний (продольных или поперечных) в материалах 1 и 2. На оси частот выделяются шесть интервалов, отмеченных буквами А – F. Рассмотрим их, начиная с интервала А.

В частотном диапазоне А располагаются акустические ветви обоих материалов, поэтому волна колебаний решётки с частотой из этого интервала может свободно проходить через интерфейсы данной полупроводниковой структуры.

В интервалах В и F имеются только частоты материала 1. В среде 1 волны с такими частотами распространяются свободно, но по отношению к среде 2 они характеризуются конечной глубиной проникновения. Эта ситуация аналогична известной картине проникновения электронной волновой функции из квантовой ямы (материал 1) в область потенциального барьера (материал 2) лишь на конечную глубину. На шкале энергии барьер отвечает запрещённой зоне материала 2. Под барьером волновой вектор k электронной волновой функции становится мнимым, $k = i\gamma$, и волновая функция экспоненциально убывает в глубь барьера; оценкой глубины проникновения под барьер является величина $1/\gamma$. В задачах о колебаниях кристаллической решётки запрещённой зоной является зазор между двумя ветвями спектра частот. Отсюда ясно, что в структуре с одиночным гетероинтерфейсом волна колебаний решётки с частотой из интервала В или F, падая на интерфейс со стороны среды 1, будет отражаться от него. Если слой материала 1 окружен слоями материала 2, то такие волны локализируются в пределах слоя 1.

Подобная же картина будет наблюдаться для оптических фононов в интервале D: здесь возможно свободное распространение и локализация фононов в слоях материала 2.

Последний случай – это частотные диапазоны С и Е, в которых волны колебаний решётки не способны распространяться в обоих материалах. В этом случае возможно существование только интерфейсных мод, поскольку их частоты могут попадать в запрещенную зону частот объёмных материалов.

Возможные типы колебаний решётки для случая, когда слой материала 2 помещён между слоями материала 1, схематично представлены на рис. 1.9.

Таким образом, мы убедились, что в гетероструктурах встречаются три разновидности волн колебаний решетки: моды, распространяющиеся через всю структуру; моды, локализованные в пределах слоя; интерфейсные моды. В последнем случае амплитуда

волны быстро (на протяжении нескольких периодов решетки) убывает в направлении удаления от гетерограницы.

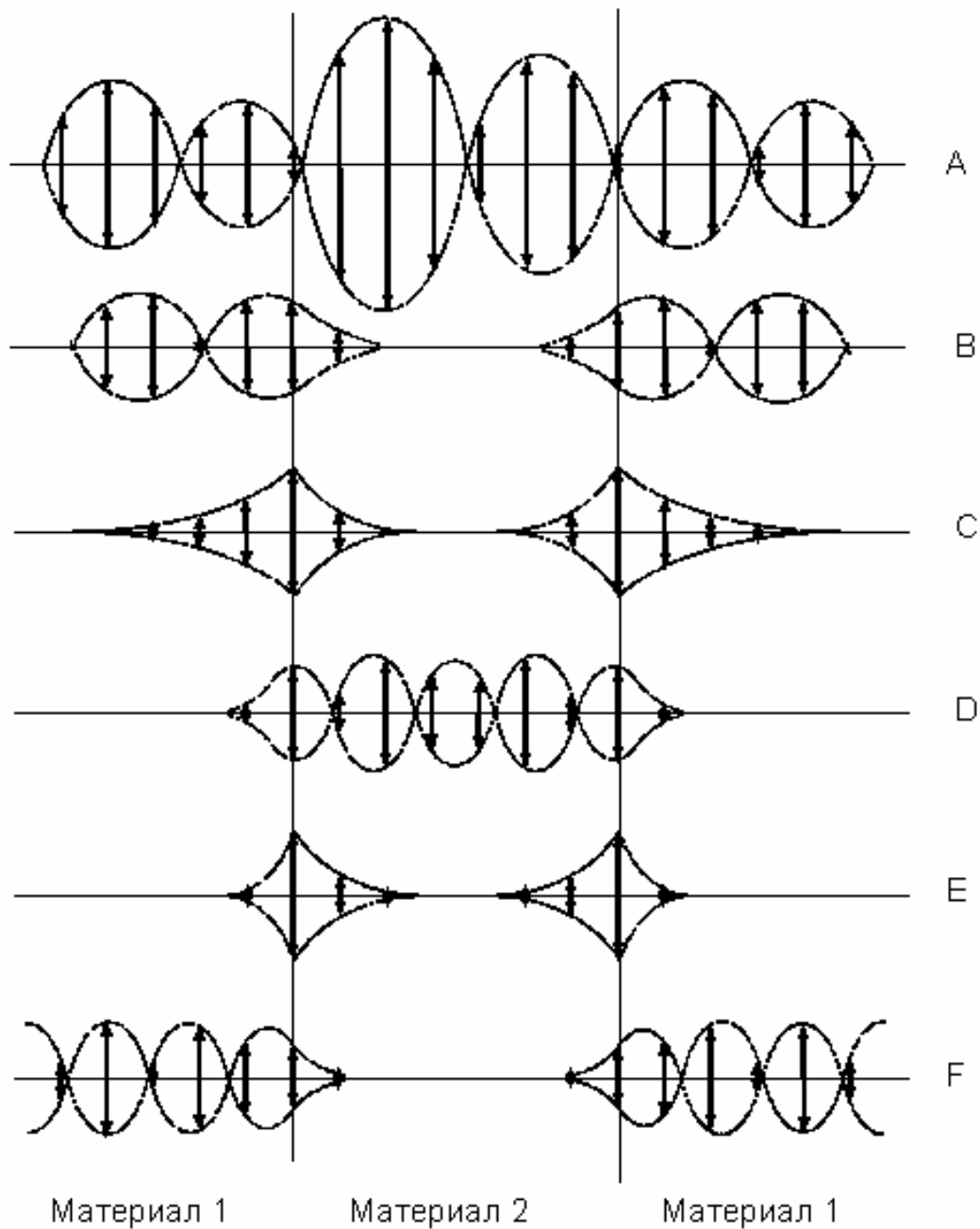


Рис. 1.9. Схема колебаний атомов решетки в двойной гетероструктуре для частотных интервалов А – F, изображенных на рис. 1.8

1.4. ЭЛЕКТРОН–ФОНОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В КВАНТОВЫХ ЯМАХ

Процессы рассеяния электронов в твердом теле оказывают существенное влияние на многие кинетические и оптические явления, поэтому представляет интерес рассмотреть особенности электронного рассеяния в структурах с пониженной размерностью, например, в квантовых ямах. Одним из важных механизмов рассеяния является рассеяние электронов на колебаниях решетки – фононах.

Рассмотрим рассеяние электронов на фононах в бесконечно глубокой прямоугольной квантовой яме шириной L (мы будем следовать работе *B.K.Ridley* // J. Phys. C: Solid State Phys. – 1982. – Vol. 15. – P. 5899). Волновые функции электрона в подзонах размерного квантования записываются следующим образом:

$$\psi(\mathbf{r}_{\parallel}, z) = \sqrt{\frac{2}{V}} u_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{r}_{\parallel}} \sin\left(\frac{\pi z}{L} n\right), \quad (1.68)$$

где $\mathbf{r}_{\parallel} = (x, y)$ и $\mathbf{k}_{\parallel} = (k_x, k_y)$ – радиус-вектор и волновой вектор электрона, лежащие в плоскости структуры, $u_{\mathbf{k}_{\parallel}}(\mathbf{r}_{\parallel}, z)$ – блоховская волновая функция, n – целое число (1, 2, ...), определяющее номер подзоны, V – нормировочный объем.

Энергия электронного состояния в n -ой размерно-квантованной подзоне с изотропной эффективной массой m равна

$$E_n(\mathbf{k}_{\parallel}) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 + \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2)}{2m} \equiv E_n + E_{k_{\parallel}}. \quad (1.69)$$

Удобно обозначить величину $\pi n/L$ как z -компоненту трёхмерного волнового вектора \mathbf{k} , то есть: $\pi n/L = k_z$. Тогда выражение (1.69) принимает вид, формально подобный выражению

для энергии электрона в зоне проводимости объёмного полупроводника:

$$E_{\mathbf{k}} \equiv \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} + \frac{\hbar^2 (k_x^2 + k_y^2)}{2m} = E_n + E_{k_{\parallel}}. \quad (1.70)$$

Из курса квантовой механики [4] известно, что в приближении первого порядка нестационарной теории возмущений скорость переходов $W_{\mathbf{k}}$ из электронного состояния \mathbf{k} во все возможные состояния \mathbf{k}' , определяемая взаимодействием электронов с рассеивающими центрами, даётся формулой «золотого правила». Для рассеяния электрона на фононах эта формула имеет следующий вид:

$$W_{\mathbf{k}} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'} |\langle \mathbf{k}' | \hat{H}_{ep} | \mathbf{k} \rangle|^2 \delta(E_{\mathbf{k}'} - E_{\mathbf{k}}), \quad (1.71)$$

где \hat{H}_{ep} – матричный элемент взаимодействия электрона с фононом, (он зависит от типа фонона), $E_{\mathbf{k}'}$ и $E_{\mathbf{k}}$ – энергия системы «электрон + фонон» в конечном и начальном состояниях.

Наряду со скоростью $W_{\mathbf{k}}$, которую можно назвать скоростью рассеяния, полезно ввести также скорость $1/\tau_{\mathbf{k}}$ релаксации направленного импульса в плоскости (x, y) :

$$\frac{1}{\tau_{\mathbf{k}}} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}'} \left(1 - \frac{\mathbf{k}'_{\parallel} \cdot \mathbf{k}_{\parallel}}{k_{\parallel}^2} \right) |\langle \mathbf{k}' | \hat{H}_{ep} | \mathbf{k} \rangle|^2 \delta(E_{\mathbf{k}'} - E_{\mathbf{k}}), \quad (1.72)$$

которая определяет кинетические характеристики электронов, в частности, их подвижность.

Фононы, участвующие в процессе рассеяния, характеризуются частотой $\omega_{\mathbf{q}}$ и волновым вектором $\mathbf{q} = (q_x, q_y, q_z)$. Как и для электрона, удобно выделить продольный волновой вектор

$\mathbf{q}_{\parallel} = (q_x, q_y)$. Для акустических фононов можно считать, что $\omega_{\mathbf{q}} = sq$ (s – скорость звука: $s = (\Lambda/\rho)^{1/2}$), а для оптических фононов: $\omega_{\mathbf{q}} = \omega_0 = \text{const}$. Матричный элемент электрон-фононного взаимодействия может быть рассчитан подобно трехмерному случаю (см., например, [1]). Необходимо только отделить интегрирование по координате z , поскольку зависимость волновой функции от z в двумерном и трехмерном случаях различна. По отношению к процессам взаимодействия с электронами фононы подразделяются на «деформационные» и «полярные». В кристаллах с ковалентной химической связью влияние фононов (колебаний кристаллической решётки) на электронную подсистему обусловлено, в основном, деформацией решётки в процессе колебаний. В кристаллах с заметной долей ионной связи колебания ионов противоположной полярности порождают дальнедействующее электрическое поле (поляризационные волны); о взаимодействии электронов с этим полем говорят как о рассеянии на полярных фононах. В результате расчётов могут быть получены следующие выражения:

а) для рассеяния электронов на деформационных акустических фононах:

$$\left| \langle \mathbf{k}' | \hat{H}_{ep} | \mathbf{k} \rangle \right|^2 = \frac{\Xi^2 k_B T}{2\rho s^2 V} |G(q_z)|^2 \delta_{\mathbf{k}-\mathbf{k}', \pm \mathbf{q}_{\parallel}}; \quad (1.73, a)$$

б) для рассеяния на деформационных оптических фононах:

$$\left| \langle \mathbf{k}' | \hat{H}_{ep} | \mathbf{k} \rangle \right|^2 = \frac{\hbar D_0^2}{2\rho \omega_0 V} |G(q_z)|^2 \delta_{\mathbf{k}-\mathbf{k}', \pm \mathbf{q}_{\parallel}} \left(N(\omega_0) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right); \quad (1.73, б)$$

в) для рассеяния электронов на полярных оптических фононах:

$$\left| \langle \mathbf{k}' | \hat{H}_{ep} | \mathbf{k} \rangle \right|^2 = \frac{e^2 \hbar \omega_0}{2} \frac{q^2 (\varepsilon_\infty^{-1} - \varepsilon_0^{-1})}{(q^2 + q_0^2)^2} |G(q_z)|^2 \delta_{\mathbf{k}-\mathbf{k}', \pm \mathbf{q}_\parallel} \left(N(\omega_0) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right). \quad (1.73, \text{в})$$

Здесь Ξ – константа акустического деформационного потенциала, D_0 – константа оптического деформационного потенциала, ε_∞ и ε_0 – высокочастотная и статическая диэлектрические проницаемости, $G(q_z)$ – интеграл перекрытия (см. ниже), q_0 – обратная длина экранирования, $\delta_{\mathbf{k}-\mathbf{k}', \pm \mathbf{q}_\parallel}$ отражает закон сохранения продольного квазиимпульса, который выполняется в силу наличия трансляционной симметрии в плоскости структуры: $\mathbf{k}_\parallel = \mathbf{k}'_\parallel \pm \mathbf{q}_\parallel$. Знаки + и – в (1.73) соответствуют переходам с испусканием и поглощением фонона, соответственно.

При переходе в выражениях (1.71) – (1.72) от суммирования по всем конечным состояниям к интегрированию удобно заменить волновой вектор электрона \mathbf{k}'_\parallel однозначно связанным с ним волновым вектором фонона \mathbf{q}_\parallel . Тогда выражение (1.71), например, переписется так:

$$W_{\mathbf{k}} = \frac{2\pi}{\hbar} \iiint \left| \langle \mathbf{k}' | \hat{H}_{ep} | \mathbf{k} \rangle \right|^2 \delta(E_{\mathbf{k}'} - E_{\mathbf{k}}) \frac{V}{(2\pi)^3} q_\parallel dq_\parallel dq_z d\theta, \quad (1.74)$$

где θ – азимутальный угол в плоскости (x, y) .

Большую роль в описании процессов рассеяния в квантовых ямах, как следует из (1.73), играет интеграл перекрытия, который зависит от формы волновых функций и в рассматриваемом случае (квантовая яма бесконечной глубины) имеет вид:

$$G(q_z) = \frac{2}{L} \int_0^L e^{iq_z z} \sin(k'_z z) \sin(k_z z) dz. \quad (1.75)$$

Проанализируем это выражение. Результат вычисления интеграла представляется в следующей форме:

$$\begin{aligned}
 G(q_z) = \frac{1}{2} & \left(\frac{\sin[q_z - (k'_z - k_z)]L/2}{[q_z - (k'_z - k_z)]L/2} \exp\{i[q_z - (k'_z - k_z)]L/2\} + \right. \\
 & + \frac{\sin[q_z + (k'_z - k_z)]L/2}{[q_z + (k'_z - k_z)]L/2} \exp\{i[q_z + (k'_z - k_z)]L/2\} \\
 & - \frac{\sin[q_z - (k'_z + k_z)]L/2}{[q_z - (k'_z + k_z)]L/2} \exp\{i[q_z - (k'_z + k_z)]L/2\} - \\
 & \left. - \frac{\sin[q_z + (k'_z + k_z)]L/2}{[q_z + (k'_z + k_z)]L/2} \exp\{i[q_z + (k'_z + k_z)]L/2\} \right). \quad (1.76)
 \end{aligned}$$

Напомним, что здесь $k_z = \pi n / L$, где n – номер подзоны. Для межподзонного рассеяния электронов ($k'_z \neq k_z$) четыре слагаемых в (1.76) удаётся интерпретировать как описание четырех возможных процессов рассеяния. Амплитуда вероятности любого одного из этих процессов максимальна, соответственно, при

$$q_z = \pm(k'_z \pm k_z), \quad (1.77)$$

и при этом остальные амплитуды обращаются в ноль. Если величину k_z понимать как усреднённый поперечный импульс электрона в n -ой подзоне, то получится, что выражение (1.77) отражает закон сохранения поперечного импульса «в среднем». Процессы с $q_z = \pm(k'_z - k_z)$ соответствуют переходам электронов между подзонами без отражения – с сохранением «направления» k_z , процессы с $q_z = \pm(k'_z + k_z)$ отвечают рассеянию электронов с отражением. Это иллюстрируется рис. 1.10.

Для ясности следует подчеркнуть, что в слоистой структуре закон сохранения поперечного квазиимпульса строго не выполняется, поскольку трансляционная симметрия в направлении оси z отсутствует, так что z -составляющая истинного вектора импульса не может быть хорошим квантовым числом. Это означает, что наряду с процессами, изображенными на рис. 1.10, возможны переходы и с другими значениями q_z . Однако переходы, изображенные на рис. 1.10, все же характеризуются максимальными амплитудами вероятности.

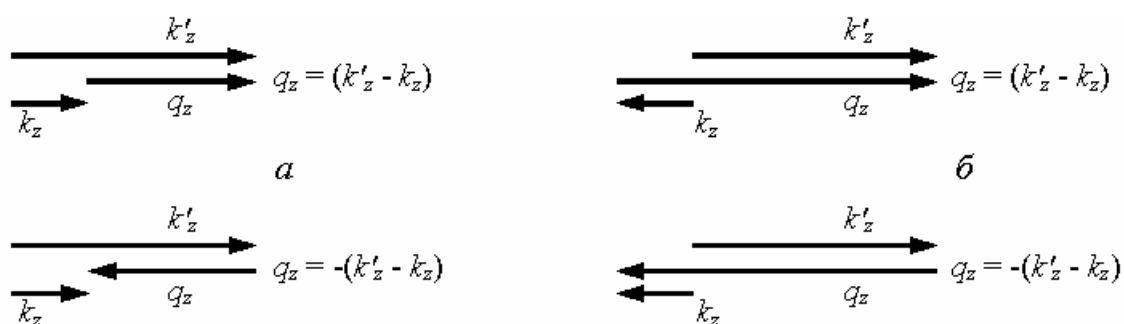


Рис. 1.10. Диаграммы, иллюстрирующие процессы межподзонного рассеяния электронов. *a* – без отражения; *б* – с отражением

Кроме того, следует заметить, что эти переходы не независимы. Согласно законам квантовой механики вероятность процесса равна квадрату модуля амплитуды вероятности. При возведении в квадрат амплитуды $G(q_z)$, имеющей вид суммы амплитуд, возникают перекрестные члены, называемые интерференционными. В связи с этим принято говорить, что процессы, изображенные на рис. 1.10, *интерферируют* друг с другом. Эту интерференцию необходимо учитывать при точном расчете вероятностей переходов.

Для внутризонного рассеяния ($k'_z = k_z$) ситуация несколько иная. Первые два члена в (1.76) становятся идентичными, их амплитуды достигают максимума одновременно при $q_z = 0$, что можно охарактеризовать как конструктивную интерференцию. В отличие от случая межподзонного рассеяния, когда интерференция не

дает существенного вклада в результат, в данном случае конструктивная интерференция между первыми двумя членами существенна.

На данном этапе целесообразно использовать приближение, которое позволит легко продолжить аналитические вычисления. Это приближение уже обсуждалось нами и может быть названо *приближением сохранения поперечного квазиимпульса*. Оно состоит, на первом шаге, в пренебрежении интерференционными членами (за исключением конструктивной интерференции при $k'_z = k_z$).

Для случая $k'_z = k_z$ получаем:

$$|G(q_z)|^2 \approx \frac{1}{4} \left[4 \left(\frac{\sin q_z L/2}{q_z L/2} \right)^2 + \left(\frac{\sin(q_z - 2k_z)L/2}{(q_z - 2k_z)L/2} \right)^2 + \left(\frac{\sin(q_z + 2k_z)L/2}{(q_z + 2k_z)L/2} \right)^2 \right]. \quad (1.78)$$

В случае $k'_z \neq k_z$ такое приближение даёт:

$$|G(q_z)|^2 \approx \frac{1}{4} \left[\left(\frac{\sin(q_z - (k'_z - k_z))L/2}{(q_z - (k'_z - k_z))L/2} \right)^2 + \left(\frac{\sin(q_z + (k'_z - k_z))L/2}{(q_z + (k'_z - k_z))L/2} \right)^2 + \left(\frac{\sin(q_z - (k'_z + k_z))L/2}{(q_z - (k'_z + k_z))L/2} \right)^2 + \left(\frac{\sin(q_z + (k'_z + k_z))L/2}{(q_z + (k'_z + k_z))L/2} \right)^2 \right]. \quad (1.79)$$

Второй шаг, используемый в приближении сохранения поперечного импульса, состоит в упрощении интеграла перекрытия $G(q_z)$. Функциональная зависимость $G(q_z)$ такова, что функцию $|G(q_z)|^2$ можно приближённо заменить дельта-функцией:

$$\int_{q_{z \min}}^{q_{z \max}} f(q_z) |G(q_z)|^2 dq_z \approx \int_{-\infty}^{+\infty} f(q_z) \frac{\pi}{2L} \delta(q_z - q_{z0}) dq_z \approx \frac{\pi}{2L} f(q_{z0}), \quad (1.80)$$

где q_{z0} – одно из четырех значений, удовлетворяющих (1.77) (см. рис. 1.10), $f(q_z)$ – любая функция.

Оценки показывают, что приближение сохранения поперечного импульса хорошо оправдывается для межподзонных переходов. Ситуация при внутривидовом рассеянии несколько хуже, здесь погрешность, вносимая таким приближением, возрастает с уменьшением $q_{\parallel}L$, однако и в этом случае эта ошибка при $q_{\parallel}L > 1$ не превышает 60% и может считаться приемлемой для приближенных расчетов.

Вернёмся к обсуждению различных механизмов рассеяния электронов на фононах (см. (1.73)).

1.4.1. Рассеяние электронов на деформационном потенциале

Рассеяние на деформационном потенциале характеризуется отсутствием зависимости матричного элемента рассеяния от волнового вектора фонона \mathbf{q} , что приводит к отсутствию зависимости вероятности рассеяния от направления волнового вектора \mathbf{k}_{\parallel} . В этом случае суммирование в (1.71) и (1.72) выполняется достаточно просто. Пусть n – номер подзоны начального состояния электрона, $g(E) = m/(2\pi\hbar^2L)$ – плотность состояний в двумерной подзоне (при заданной проекции спина). Тогда в случае рассеяния электрона на акустических фононах:

$$W_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\tau_{\mathbf{k}}} = \sum_{l=1}^{l_{\max}} \frac{(2 + \delta_{ln})\pi\Xi^2 k_B T}{\hbar\Lambda} g(E_{\mathbf{k}}). \quad (1.81)$$

Для рассеяния на оптических фононах:

$$W_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\tau_{\mathbf{k}}} = \sum_{l=1}^{l_{\max}} \frac{(2 + \delta_{ln})\pi D_0^2}{2\rho\omega_0} [N(\omega_0)g(E_{\mathbf{k}} + \hbar\omega_0) + (N(\omega_0) + 1)g(E_{\mathbf{k}} - \hbar\omega_0)]. \quad (1.82)$$

Для рассеяния на акустических фононах максимальный номер подзоны конечного состояния l_{\max} определяется из равенства

$$\frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} l_{\max}^2 = E_{\mathbf{k}} = E_{k_{\parallel}} + E_n, \quad (1.83)$$

а для рассеяния на оптических фононах – из соотношения

$$\frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} l_{\max}^2 = E_{\mathbf{k}} \pm \hbar\omega_0. \quad (1.84)$$

Выражения (1.81) и (1.82) в пределе с $L \rightarrow \infty$, $l_{\max} \rightarrow \infty$ дают результат, соответствующий рассеянию в однородном (объемном) полупроводнике.

В предельном случае рассеяния внутри одной подзоны (который реализуется, например, при малой толщине квантовой ямы L) выражение для скорости электронных переходов при рассеянии на акустических фононах принимает вид:

$$W_{\mathbf{k}} = \frac{3\Xi^2 m k_B T}{2\hbar^3 \Lambda L}, \quad (1.85)$$

а при рассеянии на оптических фононах:

$$W_{\mathbf{k}} = \frac{3D_0^2 m}{4\rho \hbar^2 \omega_0 L} \left(N(\omega_0) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right). \quad (1.86)$$

Рассмотренные выражения для вероятности рассеяния электронов на фононах в квантовой яме имеют следующие отличительные черты:

- 1) отсутствие зависимости от энергии электрона (в интервале энергии, где действует данный механизм рассеяния);
- 2) резкий порог начала рассеяния с эмиссией оптических фононов;
- 3) обратно пропорциональная зависимость от толщины квантовой ямы.

Результаты расчёта по формулам (1.81) – (1.82) показаны на рис. 1.11.

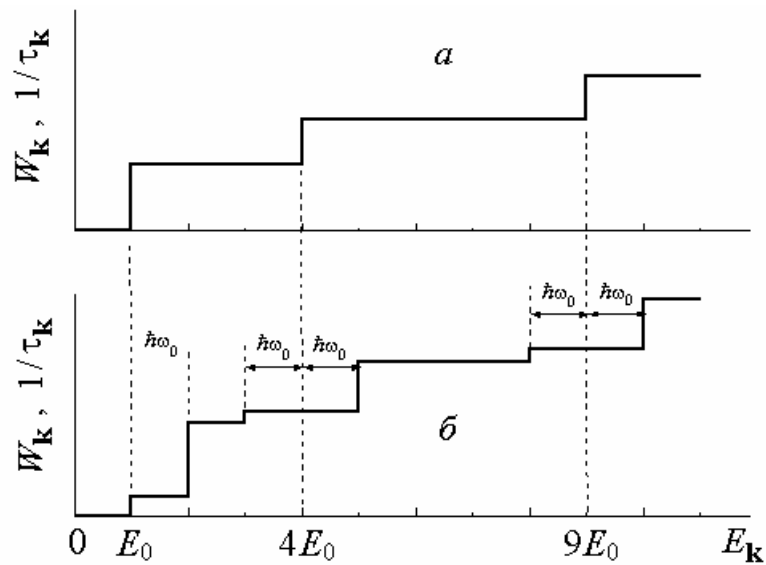


Рис. 1.11. Вероятности рассеяния электронов на фононах для двух типов взаимодействия.

a – при рассеянии на акустическом, *б* – на оптическом деформационном потенциалах. Расчет выполнен для случая $E_0 = \pi^2 \hbar^2 / (2mL^2) = \hbar\omega_0$, $N(\omega_0) = 1/4$

1.4.2. Рассеяние электронов на полярных фононах

Зависимость матричного элемента от волнового вектора фонона \mathbf{q} усложняет вычисления, однако и в данном случае приближение сохранения поперечного квазиимпульса позволяет получить аналитические выражения для вероятностей рассеяния W_k и $1/\tau_k$. Мы не будем выписывать полные выражения для этих вероятностей и отметим только случай внутриволнового рассеяния:

$$\begin{aligned}
W_{\mathbf{k}} &= \frac{e^2(\varepsilon_{\infty}^{-1} - \varepsilon_0^{-1})}{4\hbar L} \left[N(\omega_0) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right] \times \\
&\times \left(2 + \frac{\hbar\omega_0}{\left[16E_0^2 + 8E_0(2E_{\mathbf{k}} \pm \hbar\omega_0) + (\hbar\omega_0)^2 \right]^{1/2}} \right) \approx \\
&\approx \frac{e^2(\varepsilon_{\infty}^{-1} - \varepsilon_0^{-1})}{2\hbar L} \left[N(\omega_0) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right]_{E_0 \gg \hbar\omega_0/4},
\end{aligned} \tag{1.87}$$

$$\begin{aligned}
\frac{1}{\tau_{\mathbf{k}}} &= \frac{e^2\omega_0(\varepsilon_{\infty}^{-1} - \varepsilon_0^{-1})}{8LE_{\mathbf{k}}} \left[N(\omega_0) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right] \times \\
&\times \left(3 \mp 2 - \frac{4E_0 \pm \hbar\omega_0}{\left[16E_0^2 + 8E_0(2E_{\mathbf{k}} \pm \hbar\omega_0) + (\hbar\omega_0)^2 \right]^{1/2}} \right) \approx \\
&\approx \frac{e^2\omega_0(\varepsilon_{\infty}^{-1} - \varepsilon_0^{-1})}{8LE_{\mathbf{k}}} \left[N(\omega_0) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right] \left(2 \mp 2 + \frac{E_{\mathbf{k}}}{2E_0} \right)_{E_0 \gg \hbar\omega_0/4}.
\end{aligned}$$

На рис. 1.12 приведены вероятности рассеяния электронов на полярных оптических фононах, рассчитанные при тех же условиях, что и кривые на рис. 1.11.

Анализируя результаты расчётов, можно прийти к следующим выводам о рассеянии электронов на полярных оптических фононах в квантовой яме:

1) вероятность рассеяния $W_{\mathbf{k}}$ не зависит от энергии (за исключением скачков при включении рассеяния с эмиссией фононов);

2) скорость релаксации направленного импульса, связанная с поглощением фононов, сравнительно мала и также не зависит от энергии:

$$\frac{1}{\tau_{\mathbf{k}}} = \frac{e^2\omega_0 mL(\varepsilon_{\infty}^{-1} - \varepsilon_0^{-1})}{8\pi^2\hbar^2} N(\omega_0); \tag{1.88}$$

3) скорость релаксации направленного импульса, связанная с испусканием фононов, сравнительно велика:

$$\frac{1}{\tau_{\mathbf{k}}} = \frac{e^2 \omega_0 (\varepsilon_{\infty}^{-1} - \varepsilon_0^{-1})}{2LE_{\mathbf{k}}} (N(\omega_0) + 1). \quad (1.89)$$

Она совпадает со скоростью рассеяния при $E_{\mathbf{k}} = \hbar\omega_0$ и затем уменьшается с ростом энергии. В отличие от случая поглощения фонона (1.88), эта вероятность увеличивается с уменьшением L .

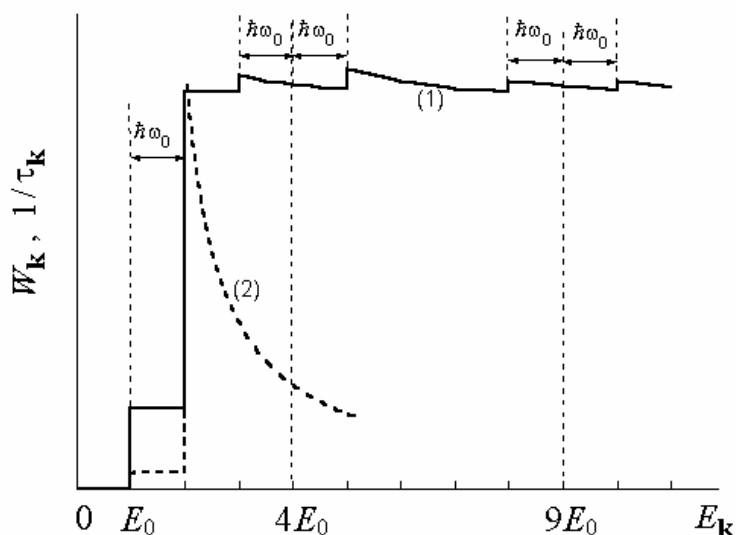


Рис. 1.12. Вероятность рассеяния (1) и скорость релаксации направленного импульса (2) при рассеянии электронов на полярных оптических фононах.

Расчет выполнен для случая $E_0 = \pi^2 \hbar^2 / (2mL^2) = \hbar\omega_0$, $N(\omega_0) = 1/4$

Приближение сохранения поперечного квазиимпульса, использованное в данном разделе, конечно, не дает совершенно точных результатов. Однако оно позволяет получить относительно простые аналитические выражения, исследовать основные закономерности рассеяния электронов, выполнить предельный переход к случаю трехмерного движения. Более аккуратное описание процессов рассеяния электронов на фононах в квантовых ямах приведено, например, в работе *B. K. Ridley // Rep. Prog. Phys. – 1991. – Vol. 54. – P. 169.*

2. ПРИМЕСНЫЕ СОСТОЯНИЯ В СИСТЕМАХ С ПОНИЖЕННОЙ РАЗМЕРНОСТЬЮ

Изучая электронные состояния в кристаллических структурах, мы в первую очередь уделяем внимание делокализованным (зонным) состояниям, которые формируются под действием периодического потенциала решётки. В однородном (объемном) кристалле такие состояния описываются волновыми функциями Блоха.

В системе с пониженной размерностью, например, в квантовой яме, волновая функция электрона вследствие взаимодействия с интерфейсами модифицируется – принимает вид линейной комбинации блоховских состояний, отражающихся от стенок потенциальной ямы. Кроме того, в интервале энергии, отвечающем размерно-квантованным подзонам, волновая функция приобретает «хвосты» с мнимыми значениями волнового вектора в области потенциальных барьеров. Подобная локализация электрона в пределах квантовой ямы, получившая название «конфайнмент», не препятствует свободному движению электрона вдоль интерфейсов и в этом отношении, строго говоря, не является «локализацией». В многослойной наноструктуре, такой как периодическая сверхрешётка, локализация отсутствует во всех трёх направлениях, поскольку в энергетическом спектре образуются разрешённые минизоны. Волновая функция электрона в минизоне имеет блоховский вид, то есть она описывает неограниченное движение электрона в направлении, поперечном к плоскости интерфейсов. Указанное описание электронных состояний подробно рассматривалось в первой части нашего учебного пособия.

Однако такое описание является достаточным только для идеализированных моделей, в которых не учитываются структурные несовершенства материалов и, в том числе, примесные центры.

Многие важные с точки зрения практических применений электронные свойства полупроводников обусловлены именно наличием примесных состояний. Примесные атомы (и собственные дефекты, например вакансии) служат источниками носителей заряда, а также являются рассеивающими центрами. В гетероструктурах области с легирующими примесными центрами могут быть пространственно отделены от областей, заселённых большим количеством подвижных носителей заряда – «электронным газом». В таких системах электростатический потенциал ионизованных примесей и электронного газа заметно изменяет энергетическую диаграмму полупроводниковой структуры по сравнению с картиной прямоугольного рельефа, предполагаемой в простейших моделях одноэлектронного потенциала.

Представляет интерес также влияние размерного квантования на энергетический спектр и волновые функции самих примесных состояний. Обычно энергетический уровень примесного электронного состояния находится в запрещенной зоне; при этом состояние является локализованным – его волновая функция убывает с расстоянием от центра во всех направлениях, характеризуясь определенным радиусом локализации. В тех случаях, когда радиус локализации намного превышает величину периода кристаллической решетки, примесное состояние можно рассматривать в рамках метода эффективной массы. Эта ситуация имеет место в задаче о мелком примесном уровне в кулоновском потенциале. Если длина, характеризующая потенциальный рельеф наноструктуры, меньше радиуса локализации волновой функции примесного состояния, то можно ожидать заметного влияния размерных эффектов на положение примесных уровней энергии и характер локализации примесного состояния. Ниже мы рассматриваем эту задачу, следуя [6, 7].

2.1. ВОДОРОДОПОДОБНЫЙ ПРИМЕСНЫЙ ЦЕНТР

Рассмотрим сначала водородоподобный (кулоновский) примесный центр в объемном материале. Взаимодействие электрона и примесного иона во многих случаях может быть описано кулоновским потенциалом:

$$U_{\text{imp}}(r) = -\frac{e^2}{\varepsilon_0 r}, \quad (2.1)$$

где ε_0 – статическая диэлектрическая проницаемость материала, $r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2}$ – расстояние до примесного центра; начало координат помещено в центр примесного иона. Величина $-e^2$ представляет собой произведение заряда электрона на заряд иона, который здесь полагается равным по величине и противоположным по знаку заряду электрона.

Если принять, что электронные состояния в зоне проводимости полупроводника описываются в рамках метода эффективной массы в однозонной изотропной модели, то уравнение Шредингера для волновых функций $\psi(\mathbf{r})$ и уровней энергии E стационарных состояний электрона в потенциале (2.1) запишется в виде:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi - \frac{e^2}{\varepsilon_0 r} \psi = E \psi, \quad (2.2)$$

где m – эффективная масса электрона, Δ – оператор Лапласа.

Это уравнение подобно по своей форме уравнению Шредингера для электрона в атоме водорода и отличается от него только заменой массы m_e электрона в вакууме на эффективную массу m электрона в полупроводнике, а также заменой квадрата заряда электрона e^2 на

e^2/ϵ_0 . Поэтому можно воспользоваться известным решением для атома водорода [4], произведя в нём указанную замену. Волновые функции стационарных состояний в сферической системе координат имеют вид произведения радиальной и угловой функций:

$$\Psi_{n_r, l, m}(r, \theta, \varphi) = R_{n_r, l}(r) Y_{lm}(\theta, \varphi), \quad (2.3)$$

где $n_r = 0, 1, 2, \dots$ – радиальное квантовое число (оно равно количеству узлов радиальной функции $R_{n_r, l}(r)$), $l = 0, 1, 2, \dots$ – орбитальный момент импульса (в единицах \hbar), $m = l, l-1, \dots, -l$ – проекция момента на ось z . Уровни энергии не зависят от квантового числа m (его не следует смешивать с массой электрона), то есть они $(2l+1)$ -кратно вырождены по m , причём от квантовых чисел n_r и l уровни энергии зависят только через сумму

$$n \equiv n_r + l + 1 = 1, 2, \dots, \quad (2.4)$$

называемую главным квантовым числом:

$$E_n = -\frac{me^4}{2\hbar^2\epsilon_0^2} \frac{1}{(n_r + l + 1)^2} \equiv -Ry_0 \frac{1}{n^2}. \quad (2.5)$$

Здесь $Ry_0 = me^4/(2\hbar^2\epsilon_0^2)$ – эффективная постоянная Ридберга; её величина может быть существенно меньше, чем величина постоянной Ридберга для атома водорода ($Ry \equiv m_e e^4/(2\hbar^2) \approx 13,6$ эВ), поскольку в полупроводнике обычно $m < m_e$ и $\epsilon_0 > 1$.

Примесные уровни (2.5) расположены в запрещённой зоне, ниже края зоны проводимости, выбранного за начало отсчёта энергии. Каждому уровню E_n (с $n > 1$) принадлежат n^2 состояний (2.3), различающихся значениями квантовых чисел. С учётом спина

кратность вырождения уровней E_n увеличивается вдвое и составляет уже $2n^2$.

Обычно главную роль играет основное состояние – обладающее наименьшей энергией. Волновая функция (2.3) в случае основного состояния соответствует квантовым числам $n_r = 0$, $l = 0$, $m = 0$; она имеет сферическую симметрию и описывается формулой:

$$\Psi_{n=0} = \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} e^{-r/a_0}, \quad (2.6)$$

где величина

$$a_0 = \frac{\varepsilon_0 \hbar^2}{m e^2} \quad (2.7)$$

называется эффективным боровским радиусом. Как видно из выражения (2.6), a_0 имеет смысл радиуса локализации примесного состояния. Энергия основного состояния (E_1) равна

$$E_1 = -\frac{m e^4}{2 \varepsilon_0^2 \hbar^2} = -Ry_0. \quad (2.8)$$

Её абсолютная величина, $|E_1|$, представляет собой энергию связи электрона на примесном центре.

Приведем количественный пример. Для GaAs: $\varepsilon_0 = 12,8$, $m = 0,067 m_e$, поэтому $Ry_0 = 5,56$ мэВ и $a_0 \approx 100 \text{ \AA}$. Поскольку глубина залегания примесного уровня E_1 оказывается малой по сравнению с шириной запрещённой зоны, примесный уровень называют мелким; примесные состояния в этой задаче получили название «водородоподобных» состояний.

Теперь рассмотрим задачу о водородоподобном примесном центре в полупроводнике, имеющем форму тонкой плёнки, или

тонкого слоя в составе полупроводниковой гетероструктуры. Если величина диэлектрической проницаемости пленки отличается от диэлектрической проницаемости подложки и вакуума, то границами привносятся силы изображения, которым соответствует некоторая добавка к кулоновскому потенциалу (2.1). В гетероструктурах различия в значениях диэлектрической проницаемости слоёв обычно незначительны, и вкладом в потенциал от сил изображения можно пренебречь.

Но и в отсутствие сил изображения энергия электрона на примесном центре в квантовой яме может отличаться от энергии примесного состояния в объемном образце: если расстояние между интерфейсами гетероструктуры не превышает эффективного боровского радиуса, то к кулоновскому потенциалу в уравнении (2.2) добавится «потенциал конфайнмента» $U_c(z)$, характеризующий рельеф дна зоны проводимости. Кроме того, энергия связи должна зависеть от того, насколько близко к интерфейсу расположен примесный центр. Полагая, как обычно, что ось z направлена по нормали к плоскости интерфейсов гетероструктуры, следует в общем случае вместо (2.2) записать уравнение Шредингера с потенциалом $U_c(z)$ и с кулоновским потенциалом $U_{imp}(x, y, z - z_i)$, зависящим от координаты примесного центра z_i :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi}{\partial z^2} \right) + U_c(z) \Psi - \frac{e^2}{\varepsilon_0 \sqrt{x^2 + y^2 + (z - z_i)^2}} \Psi = E \Psi. \quad (2.9)$$

Здесь считается, что начало координат в плоскости (x, y) помещено в центр примесного атома, и что различные положения примеси в плоскости (x, y) эквивалентны в силу трансляционной симметрии гетероструктуры в направлениях x, y .

В случае ступенчатого потенциала $U_c(z)$ волновая функция на границах слоёв должна подчиняться определённым условиям непрерывности. На первый взгляд, самая простая задача этого типа возникает в случае прямоугольной потенциальной ямы с бесконечно высокими барьерами:

$$U_c(z) = \begin{cases} 0, & 0 < z < L, \\ U_c \rightarrow \infty, & z < 0, z > L, \end{cases} \quad (2.10)$$

где L – ширина квантовой ямы. В такой задаче на волновую функцию налагается условие обращения в ноль на стенках ямы (а также всюду вне ямы):

$$\psi(x, y, z)|_{z=0} = 0, \quad \psi(x, y, z)|_{z=L} = 0. \quad (2.11)$$

Однако даже в этой сильно идеализированной модели получить точное решение при общих условиях невозможно. Это удаётся сделать только в предельном случае, когда ширина квантовой ямы мала по сравнению с эффективным боровским радиусом:

$$L \ll a_0. \quad (2.12)$$

Рассмотрим случай (2.12) подробно. Можно ожидать, что в направлении осей x и y (точнее, в любом направлении в плоскости ямы) волновая функция примесного состояния ψ заметно отличается от нуля на расстояниях от начала координат порядка a_0 . Поэтому характерный масштаб значений x и y в выражении для кулоновского потенциала имеет порядок a_0 . Однако существенные значения координаты $z - z_i$ в силу граничных условий (2.11) не превышают ширины ямы L . С учетом неравенства (2.12) это означает, что в выражении для кулоновского потенциала можно пренебречь

величиной $(z - z_i)^2$, малой по сравнению с $x^2 + y^2$, так что (2.9) примет вид уравнения с разделяющимися переменными z и (x, y) :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - \frac{e^2}{\varepsilon_0 \sqrt{x^2 + y^2}} \right] \psi + \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + U_c(z) \right] \psi = E \psi. \quad (2.13)$$

Применим к (2.13) стандартный способ разделения переменных, то есть будем искать решение ψ в форме произведения новых неизвестных функций: $\psi(\mathbf{r}) = u(x, y)v(z)$. Тогда (2.13) сводится к двум независимым уравнениям:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dz^2} + U_c(z) \right] v(z) = E^{(z)} v(z), \quad (2.14)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) - \frac{e^2}{\varepsilon_0 \sqrt{x^2 + y^2}} \right] u = E^{(x,y)} u, \quad (2.15)$$

где

$$E^{(x,y)} + E^{(z)} = E. \quad (2.16)$$

Решения уравнения (2.14) при учёте граничных условий (2.11) и прямоугольной формы потенциала (2.10) представляют собой хорошо известные одномерные состояния в потенциальной яме с бесконечными барьерами:

$$E_n^{(z)} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2, \quad v_n(z)|_{0 < z < L} = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi z n}{L}\right), \quad n = 1, 2, \dots \quad (2.17)$$

Уравнение (2.14) также является относительно простым; решение имеется в задачниках по квантовой механике, и мы воспроизводим его ниже.

Перейдем от декартовых координат x и y к полярным координатам $\rho = (x^2 + y^2)^{1/2}$ и φ , так что $x = \rho \cos \varphi$, $y = \rho \sin \varphi$. Тогда

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) u = \frac{1}{\rho} \frac{\partial u}{\partial \rho} + \frac{\partial^2 u}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2 u}{\partial \varphi^2}, \quad (2.18)$$

и в уравнении (2.15) можно произвести дальнейшее разделение переменных. Положим, что $u(\rho, \varphi) = \rho^{1/2} w(\rho) \exp(iM\varphi)$, где для однозначности волновой функции u необходимо, чтобы квантовое число M было целым:

$$M = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.19)$$

Тогда (2.15) сводится к уравнению для неизвестной радиальной функции $w(\rho)$ в нашей двумерной задаче:

$$\frac{2}{\rho} w' + w'' - \frac{(M^2 - 1/4)}{\rho^2} w + \frac{2}{a_0 \rho} w + \frac{2m}{\hbar^2} E^{(x,y)} w = 0. \quad (2.20)$$

Сравним (2.20) с уравнением для радиальной волновой функции $R(r)$ в трёхмерной задаче (2.2). С учётом того, что $\Delta Y_{lm} = -l(l+1)Y_{lm}/r^2$, задача (2.2) после разделения переменных в сферических координатах приводится к уравнению

$$\frac{2}{r} R' + R'' - \frac{l(l+1)}{r^2} R + \frac{2}{a_0 r} R + \frac{2m}{\hbar^2} E R = 0. \quad (2.21)$$

При $E < 0$ требование ограниченности функции $R(r)$ удовлетворяется только для дискретных значений E – так возникает результат (2.5). Заметим теперь, что замена r на ρ и l на $l = |M| - 1/2$ переводит уравнение (2.21) в уравнение (2.20) для волновой функции w , и функция w тоже должна удовлетворять условию ограниченности. Следовательно, дискретный спектр задачи (2.20) можно найти просто подстановкой $l = |M| - 1/2$ в формулу (2.5):

$$E_{n_r, M}^{(x, y)} = -Ry_0 \frac{1}{(n_r + |M| + 1/2)^2}. \quad (2.22)$$

Здесь квантовое число $n_r = 0, 1, 2, \dots$ интерпретируется как число узлов у решения $w(\rho)$; это продиктовано известной в квантовой механике «осцилляционной теоремой», которая устанавливает соответствие между количеством узлов собственной функции и номером собственного значения. Квантовое число M – проекция орбитального момента на ось z ; закон сохранения этой проекции момента обусловлен аксиальной симметрией двумерной задачи (2.15). Наименьшему значению энергии (2.22) соответствуют $n_r = 0$ и $M = 0$, так что:

$$E_{0, 0}^{(x, y)} = -4Ry_0. \quad (2.23)$$

Уровень ближайшего возбуждённого состояния, $-4Ry_0/9$, трёхкратно вырожден, поскольку ему отвечают три разных значения пары квантовых чисел (n_r, M) ; это $(0, -1)$, $(0, 1)$ и $(1, 0)$. Если по аналогии с (2.4) ввести «главное» квантовое число $N = 1, 2, \dots$, нумерующее уровни (2.22) в порядке их возрастания, то кратность вырождения N -го уровня будет равна $2N - 1$. При этом число N выражается через квантовые числа (n_r, M) формулой

$$N = n_r + |M| + 1, \quad (2.24)$$

а энергия примесных состояний (2.22) запишется в виде:

$$E_N^{(x,y)} = -Ry_0 \frac{1}{(N - 1/2)^2}, \quad N = 1, 2, \dots \quad (2.25)$$

Наконец, с учетом (2.16) – (2.17) окончательное выражение для уровней энергии примет вид:

$$E_{n,N} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} n^2 - Ry_0 \frac{1}{(N - 1/2)^2}. \quad (2.26)$$

Таким образом, под каждым уровнем размерного квантования (с заданным n) примесный центр создаёт водородоподобную серию уровней с различными значениями N . Все примесные уровни являются «мелкими» по отношению к интервалам $\Delta E \sim \hbar^2 / (mL^2)$ между подзонами размерного квантования; действительно, $Ry_0 \sim \hbar^2 / (ma_0^2)$, поэтому из неравенства (2.12) следует, что $Ry_0 \ll \Delta E$. Отсюда следует также, что все примесные уровни, кроме тех, которые находятся под самой нижней подзоной, расположены на фоне энергетических ветвей других подзон; значит, эти примесные состояния могут «распадаться» в состояния подзон, то есть эти примесные уровни энергии имеют конечную ширину.

Согласно формуле (2.23) в двумерной системе энергия связи электрона на кулоновском примесном центре в четыре раза больше, чем в трёхмерном случае. Такое значительное увеличение энергии связи объясняется тем, что стенки ямы шириной $L \ll a_0$ не позволяют электрону удаляться от примесного иона в направлении оси z , и энергия притяжения поэтому возрастает.

В модели (2.10) – (2.12) не удастся изучить зависимость энергетических уровней и волновых функций примесных состояний от ширины квантовой ямы, от высоты потенциальных барьеров, от отношения эффективных масс или диэлектрических проницаемостей слоёв. Подробное исследование требует численных расчётов; которые чаще всего выполняются вариационным методом с той ли иной пробной функцией, моделирующей свойства локализованных на примеси состояний. Тем не менее, в поведении примесных состояний можно отметить ряд качественных черт [7].

Так, очевидно, что при большой ширине ($L \gg a_0$) квантовой ямы В/А/В, примесные уровни центра, расположенного вблизи середины ямы, будут такими же, как у примеси, расположенной в объёмном материале А. С уменьшением ширины А-слоя волновая функция электрона на примесном центре начинает «сдавливаться» стенками ямы, что ведёт к возрастанию энергии притяжения электрона к примеси, и энергия связи будет больше, чем Ry_0 в объёмном материале А. В случае бесконечно высоких барьеров энергия связи при $L \rightarrow 0$ монотонно возрастала бы до значения $4Ry_0$ (а уровень размерного квантования поднимался бы по шкале энергии до бесконечности). Однако в случае барьеров конечной высоты уменьшение ширины А-слоя приводит к тому, что уровень размерного квантования поднимается до уровня барьера В-слоёв, и волновые функции как размерно-квантованных состояний, так и примесных проникают в материал барьеров на всё бóльшую глубину; такое ослабление конфайнмента проиллюстрировано на рис. 2.1.

Когда длина конфайнмента становится больше, чем радиус локализации a_0 примесного состояния, стенки ямы мало влияют на энергию связи электрона с примесью. В пределе с $L \rightarrow 0$ слой А исчезает, и свойства примесных состояний определяются только параметрами материала В. Энергия связи при этом будет равна эффективной постоянной Ридберга с эффективной массой электрона m и диэлектрической проницаемостью в материале В.

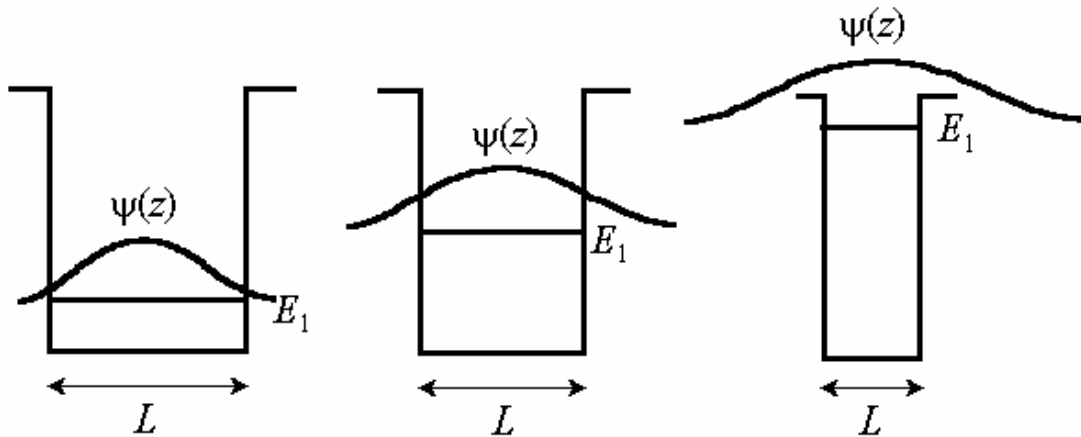


Рис. 2.1. Увеличение длины локализации связанного состояния при уменьшении ширины квантовой ямы конечной глубины

Таким образом, с уменьшением ширины ямы, имеющей барьеры конечной высоты, от больших значений ($L \gg a_0$) до малых ($L \ll a_0$) энергия связи электрона на примеси сначала возрастает от значения Ry_0 в материале А до максимального значения, сравнимого с $4Ry_0$, а затем уменьшается до значения Ry_0 в материале В, см. рис. 2.2.

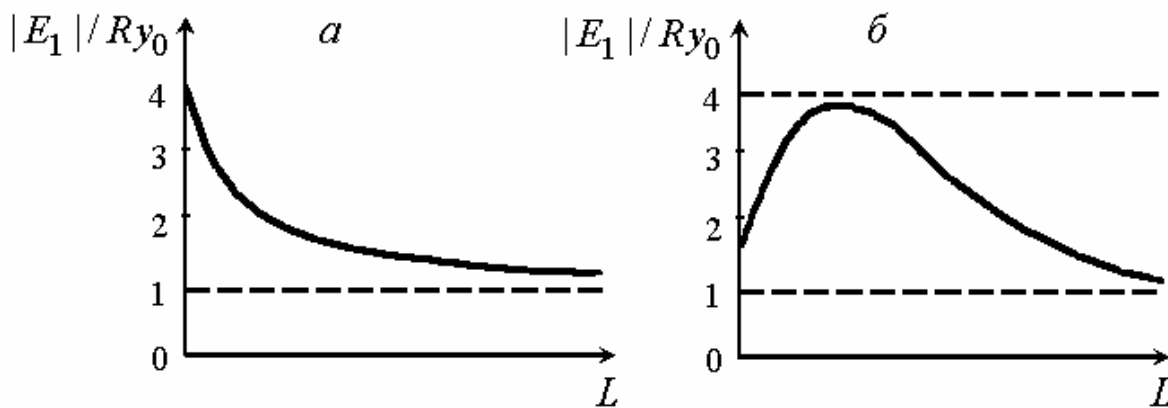


Рис. 2.2. Зависимость энергии связи электрона на примесном центре от ширины квантовой ямы (схематично). *a* – в случае ямы с бесконечно высокими стенками, *б* – со стенками конечной высоты

Энергия связи примесного состояния зависит не только от ширины квантовой ямы, но и от положения z_i примесного центра по отношению к стенкам ямы.

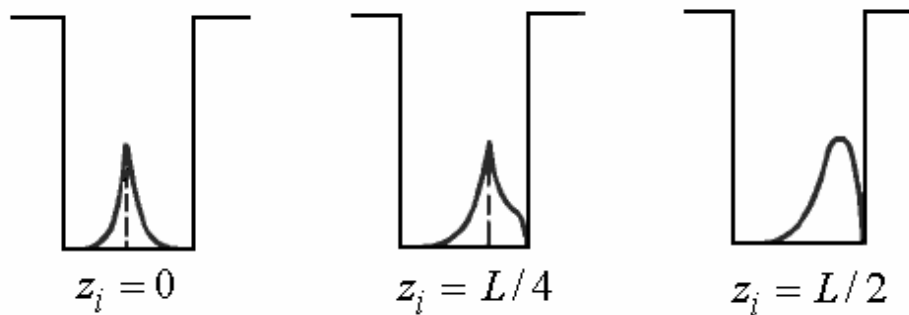


Рис. 2.3. Изменение формы волновой функции примесного состояния в зависимости от положения атома примеси относительно центра широкой ($L \gg a_0$) квантовой ямы; рис. из книги [6]

Влияние положения примеси на форму волновой функции основного состояния в широкой квантовой яме схематично показано на рис. 2.3. Расчёты показывают, что в центре ямы энергия связи больше, чем у ее края, то есть у края ямы уровень энергии примесного состояния расположен выше, чем в центре. Это можно объяснить увеличением кинетической энергии электрона в примесном состоянии, «прижатом» к стенке ямы. Действительно, из соотношения неопределённости Гейзенберга следует, что локализация электрона на интервале Δz ведёт к неопределённости импульса $\Delta p_z \sim \hbar / \Delta z$, которая даёт вклад в кинетическую энергию порядка $(\Delta p)^2 / m \sim \hbar^2 / m(\Delta z)^2$. Чем меньше интервал Δz , занимаемый электронным «облаком», тем выше энергия данного состояния. При уменьшении ширины ямы L этот эффект повышает не только энергию примеси, но и уровни размерно-квантованных состояний в подзонах.

2.2. ИНТЕРФЕЙСНЫЕ ДЕФЕКТЫ

До сих пор мы предполагали, что интерфейс гетероструктуры представляет собой плоскость, лишённую дефектов. На практике всегда имеются несовершенства интерфейса, которые, как и примесные центры, приводят к появлению локализованных

(связанных) электронных состояний. Такие дефекты, в частности, могут иметь вид выступов на плоскости интерфейса, обусловленных локальным проникновением материала из В-слоя на некоторую глубину в материал А, или наоборот. Здесь мы рассмотрим, следуя [6], схему вариационного расчёта энергии связанных состояний на дефекте, поскольку она иллюстрирует общий подход к приближённому количественному описанию дефектов различного типа.

Уравнение Шредингера для электронных состояний в гетероструктуре с интерфейсным дефектом можно записать в форме (2.9), заменив кулоновский потенциал примеси потенциалом дефекта в общем виде, $U_{\text{def}}(\mathbf{r})$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) + U_c(z)\psi + U_{\text{def}}(\mathbf{r})\psi = E\psi. \quad (2.27)$$

Операторные слагаемые в гамильтониане этого уравнения можно перегруппировать так, что уравнение примет вид

$$[\hat{H}_0(z) + \hat{T}(\partial/\partial x, \partial/\partial x) + U_{\text{def}}(\mathbf{r})]\psi = E\psi, \quad (2.28)$$

где

$$\hat{T}(\partial/\partial x, \partial/\partial x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right), \quad (2.29)$$

$$\hat{H}_0(z) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + U_c(z). \quad (2.30)$$

Здесь $\hat{H}_0(z)$ – одномерный гамильтониан гетероструктуры с идеальными интерфейсами, например, квантовой ямы с профилем зоны проводимости $U_c(z)$. Его собственные значения – обычные

уровни размерного квантования $E_n^{(z)}$ для движения электрона вдоль оси z .

Предположим, что ортонормированные собственные функции $v_n(z)$ и собственные значения энергии $E_n^{(z)}$ для гамильтониана \hat{H}_0 уже найдены:

$$\hat{H}_0 v_n(z) = E_n^{(z)} v_n(z). \quad (2.31)$$

Ищем решение уравнения (2.28) в виде:

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_n v_n(z) u_n(x, y). \quad (2.32)$$

Подставляя (2.32) в (2.28) и учитывая (2.31), получим:

$$\sum_n (v_n \hat{T} u_n + U_{\text{def}} v_n u_n) = \sum_n (E - E_n^{(z)}) v_n u_n. \quad (2.33)$$

Умножим обе стороны уравнения (2.33) на $v_{n'}(z)$ и проинтегрируем по z , учитывая условие ортонормировки функций $v_n(z)$, имеющее вид:

$$\langle v_{n'} | v_n \rangle \equiv \int_{-\infty}^{\infty} dz v_{n'} v_n = \delta_{n'n}. \quad (2.34)$$

Получим:

$$\sum_n (\delta_{n'n} \hat{T} u_n + \langle v_{n'} | U_{\text{def}} v_n \rangle u_n) = \sum_n (E - E_n^{(z)}) \delta_{n'n} u_n. \quad (2.35)$$

Предположим, что потенциал $U_{\text{def}}(x, y, z)$ не смешивает состояния с разными n , то есть можно пренебречь недиагональными членами:

$$\langle v_{n'} | U_{\text{def}} v_n \rangle = \delta_{n'n} \langle v_n | U_{\text{def}} v_n \rangle \equiv \delta_{n'n} U_{\text{eff}}(x, y), \quad (2.36)$$

где эффективный потенциал дефекта U_{eff} определён выражением:

$$U_{\text{eff}}(x, y) = \int_{-\infty}^{\infty} dz (v_n(z))^2 U_{\text{def}}(x, y, z). \quad (2.37)$$

Тогда, выполнив в (2.35) суммирование и заменив индекс n' на n , придём к уравнению Шредингера для волновой функции $u_n(x, y)$, описывающей движение электрона на n -ом размерно-квантованном уровне вдоль плоскости интерфейсов с учётом эффективного потенциала дефекта:

$$[\hat{T} + U_{\text{eff}}(x, y)] u_n(x, y) = (E - E_n^{(z)}) u_n(x, y). \quad (2.38)$$

Обычно рассматривают нижний уровень, $n = 1$, и интересуются связанными (локализованными) состояниями под этим уровнем, как в задаче о водородоподобной примеси. Если такие состояния для выбранной модели дефекта существуют, то энергия E основного состояния должна быть меньше, чем $E_n^{(z)}$, и её можно оценить вариационным методом. С этой целью выбирают в явном виде пробную волновую функцию $u_1(x, y; \lambda)$, зависящую от одного или нескольких параметров λ , нормированную на единицу. Для локализованного состояния функция $u_1(x, y; \lambda)$ должна убывать до нуля с ростом своих аргументов x и y . Если умножить обе стороны уравнения (2.38) с $n = 1$ на $u_1(x, y; \lambda)$ и проинтегрировать по x и y , то получим:

$$E^{(x, y)}(\lambda) = E - E_n^{(z)}, \text{ то есть } E = E_n^{(z)} + E^{(x, y)}(\lambda), \quad (2.39)$$

где

$$E^{(x,y)}(\lambda) = \iint dx dy u_1(x, y; \lambda) [\hat{T} + U_{\text{eff}}(x, y)] u_1(x, y; \lambda). \quad (2.40)$$

В завершение процедуры следует решить уравнение $dE^{(x,y)}(\lambda)/d\lambda = 0$, которым определяется значение $\lambda = \lambda_{\text{min}}$, доставляющее минимум энергии (2.39). Если для конкретной модели дефекта вариационная процедура приводит к результату $E^{(x,y)}(\lambda_{\text{min}}) \geq 0$, это ещё не означает отсутствия связанного состояния, так как вариационный метод даёт значение энергии, которое является оценкой сверху для истинной энергии основного состояния. В случае же $E^{(x,y)}(\lambda_{\text{min}}) < 0$ величина $|E^{(x,y)}(\lambda_{\text{min}})|$ интерпретируется как правдоподобная оценка энергии связи электрона на дефекте. Таким методом можно изучить энергетический спектр электрона на интерфейсных дефектах различных размеров и типов.

2.3. УРОВНИ ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОНОВ В ЛЕГИРОВАННЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ

Одним из важных методов управления электронными свойствами гетероструктур является целенаправленное легирование составляющих структуру материалов донорными или акцепторными примесями. Рассмотрим кратко особенности энергетической диаграммы гетероструктуры, изготовленной с применением метода модулированного легирования. Этот метод позволяет в процессе выращивания структуры внедрять примесные атомы (пусть здесь речь идёт о донорах) только в область потенциальных барьеров [6, 7]. При этом область потенциальной ямы, в которой за счет легирования образуются свободные носители заряда, остаётся почти свободной от дефектов, в результате чего подвижность носителей заряда в ней существенно повышается.

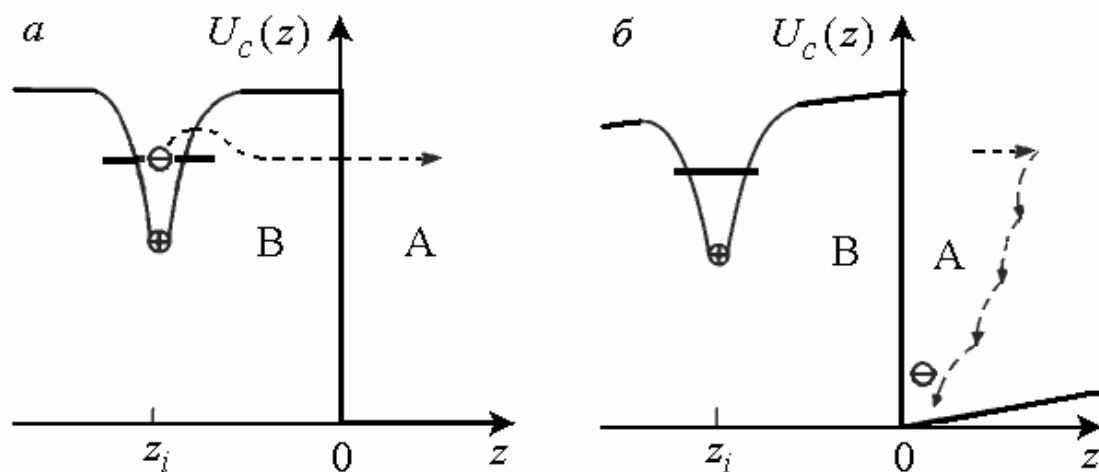


Рис. 2.4. Механизм перераспределения электрического заряда в одиночном гетеропереходе (рис. из книги [6]).

Область барьера (материал В) легирована донорной примесью. В области А, начиная от дна зоны проводимости и выше, существует континуум электронных состояний. *а* – донорный центр переходит из электрически нейтрального состояния в ионизованное, положительно заряженное состояние за счёт перемещения электрона в область А, свободную от примесей. *б* – электрон, переместившийся в область А из области В, испускает фононы и заселяет свободное состояние с энергией меньшей, чем энергия донорного уровня в материале В. Электрическое поле положительно заряженных ионов в области барьера приводит к изгибу краёв зон

На рис. 2.4 схематично показан механизм образования свободных электронов вблизи интерфейса одиночного гетероперехода В / А с селективным легированием. В этом примере материал В с более высоким положением края зоны проводимости U_c (широкозонный полупроводник) легирован донорной примесью, а материал А (узкозонный полупроводник) примесей не содержит. Если бы доноры оставались в нейтральном состоянии, то химический потенциал электронов в области В был бы выше, чем в области А, что не отвечало бы состоянию термодинамического равновесия. В равновесном состоянии уровень химического потенциала электронов должен быть постоянным по всей системе. Термодинамическое равновесие устанавливается в результате переходов электронов из области В, с донорных центров, в свободные состояния зоны

проводимости области А. Переходы осуществляются посредством туннельного эффекта или термоактивационным способом – за счёт взаимодействия с тепловыми колебаниями кристаллической решётки. Поскольку ионизованные доноры заряжены положительно, они притягивают к себе электроны, так что свободные электроны скапливаются в области А вблизи границы с областью В. Это означает, что для электронов в области А образуется потенциальная яма, которую можно представить как следствие изгиба зон.

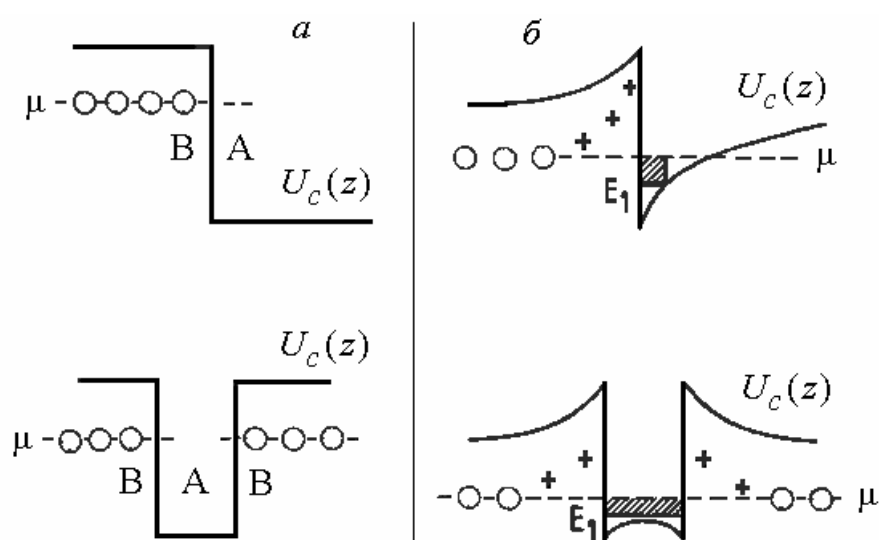


Рис. 2.5. Образование двумерного электронного газа в одиночной и в двойной гетероструктурах (рис. из книги [6]).

Верхний рисунок – одиночный гетеропереход, нижний рисунок – двойная гетероструктура с квантовой ямой. *a* – неравновесное состояние, все доноры электронейтральны. *б* – равновесное состояние. Белые кружки изображают доноры в нейтральном состоянии, крестики – положительно заряженные (ионизованные) донорные центры. Штриховкой показан двумерный электронный газ, частично заполняющий состояния размерно-квантованной подзоны E_1

Такая потенциальная яма вблизи границы В / А имеет форму, напоминающую треугольную, и в ней может образоваться одна или несколько размерно-квантованных подзон E_1, E_2, \dots . Свободные электроны, появившиеся в области А за счет переходов с доноров из

области В, заселяют состояния подзон, тем самым образуя *двумерный электронный газ*. В двойном гетеропереходе, представляющем для электронов квантовую яму В / А / В, размерно-квантованные состояния существуют уже в отсутствие легирования, но при этом они не заселены электронами. Легирование В-слоёв донорной примесью позволяет получить двумерный электронный газ также и в этом случае (см. рис. 2.5).

Особенностью рассмотренной картины является то, что для количественного анализа изгиба зон и положения уровней размерного квантования здесь необходимы *самосогласованные* расчёты – совместное решение уравнения Шредингера и уравнений электростатики, определяющих потенциальный рельеф $U_c(z)$.

3. КИНЕТИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ В СИСТЕМАХ С ПОНИЖЕННОЙ РАЗМЕРНОСТЬЮ

3.1. КИНЕТИЧЕСКИЕ КОЭФФИЦИЕНТЫ ОБЪЕМНЫХ КРИСТАЛЛОВ

Кинетические эффекты или явления переноса относятся к разряду неравновесных процессов, которые возникают в образце как реакция на внешнее воздействие, выводящее рассматриваемую систему из равновесия. Как известно, состояние равновесия характеризуется тем, что температура и электрохимический потенциал одинаковы в любой точке образца, в результате, суммарные потоки энергии и электрические токи в образце равны нулю [8]. При этом усредненное по тепловым флуктуациям число заполнения частицами квантовых состояний с волновым вектором \mathbf{k} определяется равновесной функцией распределения. Для электронов и дырок – это функция распределения Ферми – Дирака

$$f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}}) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu}{k_B T}\right) + 1}, \quad (3.1)$$

где $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ – энергия электрона в состоянии с волновым вектором \mathbf{k} и определенной проекцией спина, μ – химпотенциал; всюду в этой главе энергию частиц обозначаем буквой ε . Для фононов равновесное распределение описывается функцией Планка (то есть распределением Бозе – Эйнштейна с нулевым химпотенциалом, см. (1.20)). Здесь мы будем обсуждать только электронный вклад в явления переноса.

В присутствии внешнего воздействия, например, если к образцу приложено электрическое поле или различные участки образца

находятся при разных температурах, возникают потоки частиц, и равновесное распределение нарушается. Если внешнее воздействие постоянно во времени, то процессы рассеяния электронов при их столкновениях с дефектами решетки и с фононами приведут к установлению стационарного, то есть постоянного во времени (но, вообще говоря, неравновесного) распределения электронов и к возникновению стационарных потоков энергии и заряда. Если внешнее воздействие мало, то есть мала, например, величина градиента температуры или внешнего электрического поля, то и отличие неравновесной функции распределения $f(\mathbf{k})$ от распределения Ферми – Дирака будет невелико, и его можно описать с помощью малой добавки $f_1(\mathbf{k})$,

$$f(\mathbf{k}) = f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}}) + f_1(\mathbf{k}), \quad (3.2)$$

которая в первом приближении пропорциональна величине возмущающей силы.

С помощью неравновесной функции распределения можно вычислить плотность электрического тока \mathbf{j} и потока тепла \mathbf{q} в образце, суммируя вклады от заполненных электронами состояний:

$$\mathbf{j} = 2 \sum_{\mathbf{k}} (-e) \mathbf{v}_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}), \quad (3.3)$$

$$\mathbf{q} = 2 \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \mathbf{v}_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}). \quad (3.4)$$

В этих выражениях $\mathbf{v}_{\mathbf{k}} = \hbar^{-1} \partial \varepsilon_{\mathbf{k}} / \partial \mathbf{k}$ – скорость электрона с волновым вектором \mathbf{k} ; множителем 2 учитывается тот факт, что при каждом значении \mathbf{k} имеется два состояния электрона, различающихся знаком проекции спина. Скорость электрона – нечетная функция волнового вектора: $\mathbf{v}_{-\mathbf{k}} = -\mathbf{v}_{\mathbf{k}}$, так как $\varepsilon_{-\mathbf{k}} = \varepsilon_{\mathbf{k}}$. Если подставить

выражение (3.2) для функции распределения в (3.3), то сумма по \mathbf{k} распадется на две суммы,

$$\mathbf{j} = -2 \sum_{\mathbf{k}} e \mathbf{v}_{\mathbf{k}} f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}}) - 2 \sum_{\mathbf{k}} e \mathbf{v}_{\mathbf{k}} f_1(\mathbf{k}) = -2 \sum_{\mathbf{k}} e \mathbf{v}_{\mathbf{k}} f_1(\mathbf{k}), \quad (3.5)$$

причем первое слагаемое, содержащее $f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}})$, в (3.5) оказывается равным нулю, поскольку под знаком суммы стоит функция, нечетная по \mathbf{k} . Это вполне соответствует тому факту, что в отсутствии внешних воздействий, когда распределение электронов совпадает с равновесным, тока в образце нет. Аналогично и в выражении (3.4) для потока тепла останется вклад только от неравновесной добавки к функции распределения:

$$\mathbf{q} = 2 \sum_{\mathbf{k}} (\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu) \mathbf{v}_{\mathbf{k}} f_1(\mathbf{k}). \quad (3.6)$$

Таким образом, чтобы рассчитать электрический ток и поток тепла через образец, необходимо найти неравновесную добавку к функции распределения. Она может измениться, с одной стороны, из-за внешних воздействий, связанных, например, с изменением координаты и волнового вектора электрона под действием электрического поля. С другой стороны, ее изменение связано с процессами рассеяния частиц на дефектах кристалла, приводящих к переходам электронов между состояниями с различными волновыми векторами. В стационарном состоянии эти процессы должны уравновесить друг друга. Уравнение, которое отражает этот баланс, называется уравнением Больцмана. Решив его, можно найти неравновесную добавку к функции распределения.

Однако уравнение Больцмана имеет вид интегро-дифференциального уравнения, и найти его решение в общем случае достаточно сложно. Поэтому используют различные приближенные методы, одним из которых является метод введения времени

релаксации. Время релаксации τ вводится для описания процессов рассеяния; оно характеризует скорость восстановления равновесного распределения после отключения внешнего воздействия:

$$(f(\mathbf{k}) - f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}}))_t = (f(\mathbf{k}) - f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}}))_0 \exp(-t/\tau).$$

Время релаксации можно ввести, если закон дисперсии электронов $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ изотропный (обладает сферической симметрией), а рассеяние происходит упруго, то есть изменение энергии электрона при рассеянии малó. При этом для обратного времени релаксации можно получить следующее выражение [9]

$$\tau^{-1}(k) = \sum_{\mathbf{k}'} W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') \left(1 - \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}'}{k^2} \right), \quad (3.7)$$

где $W(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ – вероятность рассеяния электронов из состояния с волновым вектором \mathbf{k} в состояние с волновым вектором \mathbf{k}' .

Если известно время релаксации, то неравновесная добавка к функции распределения может быть рассчитана следующим образом:

$$f_1(\mathbf{k}) = \left(-\frac{\partial f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}})}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right) (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \Phi(\varepsilon_{\mathbf{k}})) \tau(k), \quad (3.8)$$

где $\Phi(\varepsilon_{\mathbf{k}})$ – обобщенная возмущающая сила, которую в отсутствии магнитного поля можно записать в виде

$$\Phi(\varepsilon_{\mathbf{k}}) = e \nabla(\phi_0 - \mu/e) - \frac{\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu}{T} \nabla T. \quad (3.9)$$

Она включает в себя динамическое воздействие со стороны внешнего электрического поля, описываемое градиентом

электростатического потенциала ϕ_0 , а также учитывает статистические факторы, связанные с градиентами химпотенциала и температуры.

Из (3.5), (3.6) с учетом (3.8) и (3.9) видно, что плотность электрического тока и потока тепла оказываются пропорциональными градиентам электрохимического потенциала $\nabla(\mu - e\phi_0)$ и температуры ∇T .

Для дальнейших расчетов удобно ввести символ усреднения, записав, например, (3.3) в виде

$$\mathbf{j} = -e \langle \mathbf{v} \rangle n, \quad (3.10)$$

где n – концентрация электронов, а $\langle \mathbf{v} \rangle$ – их средняя скорость. В трехмерном образце объемом V выражение для концентрации задается формулой

$$n = \frac{2}{V} \sum_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) = \frac{2}{V} \sum_{\mathbf{k}} f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}}), \quad (3.11)$$

В этом выражении удобно перейти от суммирования к интегрированию в сферической системе координат. Интегрирование по углам сводится к умножению на 4π , и концентрация оказывается равной

$$n = \int_0^{\infty} f_0(\varepsilon) \frac{k^2 dk}{\pi^2}. \quad (3.12)$$

Сравнивая это выражение с обычным выражением для концентрации в виде интеграла по энергии от функции распределения с учетом плотности состояний

$$n = \int_0^{\infty} f_0(\varepsilon) g_{3D}(\varepsilon) d\varepsilon \quad (3.13)$$

видим, что плотность состояний в произвольной сферической зоне задается выражением

$$g_{3D}(\varepsilon) = \frac{1}{3\pi^2} \frac{\partial k^3(\varepsilon)}{\partial \varepsilon}. \quad (3.14)$$

Проведя в (3.13) интегрирование по частям с учетом (3.14), получим:

$$n = \frac{1}{3\pi^2} \int_0^\infty \left(-\frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) k^3(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (3.15)$$

Среднюю скорость, входящую в (3.10), можно рассчитать аналогичным образом

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{v} \rangle &= \frac{2}{nV} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} f(\mathbf{k}) = \frac{2}{nV} \sum_{\mathbf{k}} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} f_1(\mathbf{k}) = \\ &= \frac{2}{nV} \sum_{\mathbf{k}} \left(-\frac{\partial f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}})}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right) \mathbf{v}_{\mathbf{k}} (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \Phi(\varepsilon_{\mathbf{k}})) \tau(k). \end{aligned} \quad (3.16)$$

Перейдем, как и выше, от суммирования к интегрированию в сферической системе координат, выбрав полярную ось вдоль вектора $\Phi(\varepsilon_{\mathbf{k}})$; тогда

$$\langle \mathbf{v} \rangle = \frac{1}{4\pi^3 n} \int_{\Omega} \begin{Bmatrix} \sin \theta \cos \phi \\ \sin \theta \sin \phi \\ \cos \theta \end{Bmatrix} \cos \theta d\Omega \int_0^\infty k^2 dk \left[\left(-\frac{\partial f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}})}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right) \tau(k) v_{\mathbf{k}}^2 \Phi(\varepsilon_{\mathbf{k}}) \right]. \quad (3.17)$$

Интегрирование по сферическому углу Ω дает вектор $(4\pi/3)\{0,0,1\}$, поэтому

$$\langle \mathbf{v} \rangle = \frac{1}{3\pi^2 n} \int_0^\infty \left(-\frac{\partial f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}})}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right) \tau(k) v_{\mathbf{k}}^2 \Phi(\varepsilon_{\mathbf{k}}) k^2 dk. \quad (3.18)$$

Переходя к интегрированию по энергии, получим

$$\langle \mathbf{v} \rangle = \frac{1}{3n} \int_0^\infty \left(-\frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) \tau(\varepsilon) \Phi(\varepsilon) v^2(\varepsilon) g_{3D}(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (3.19)$$

Наконец, используя определение эффективной массы $m(k) = p/v_k = \hbar^2 k / (\partial \varepsilon / \partial k)$, получим

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{v} \rangle &= \frac{1}{3n} \int_0^\infty \left(-\frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) \tau(\varepsilon) \Phi(\varepsilon) \left(\frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon}{\partial k} \right)^2 \frac{k^2(\varepsilon)}{\pi^2} \frac{\partial k}{\partial \varepsilon} d\varepsilon = \\ &= \frac{1}{3n} \int_0^\infty \left(-\frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) \tau(\varepsilon) \Phi(\varepsilon) \left(\frac{1}{\hbar^2 k(\varepsilon)} \frac{\partial \varepsilon}{\partial k} \right) \frac{k^3(\varepsilon)}{\pi^2} d\varepsilon = \\ &= \frac{1}{3\pi^2 n} \int_0^\infty \left(-\frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) \frac{\tau(\varepsilon)}{m(\varepsilon)} \Phi(\varepsilon) k^3(\varepsilon) d\varepsilon. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Определим теперь символ усреднения для любой функции энергии $\mathbf{A}(\varepsilon)$ следующим образом

$$\langle \mathbf{A}(\varepsilon) \rangle = \frac{1}{3\pi^2 n} \int_0^\infty \left(-\frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) \mathbf{A}(\varepsilon) k^3(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{\int_0^\infty \left(-\frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) \mathbf{A}(\varepsilon) k^3(\varepsilon) d\varepsilon}{\int_0^\infty \left(-\frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) k^3(\varepsilon) d\varepsilon}. \quad (3.21)$$

Этот символ усреднения обладает свойствами линейного оператора, то есть $\langle a \rangle = a$ и $\langle a \mathbf{A}(\varepsilon) + b \mathbf{B}(\varepsilon) \rangle = a \langle \mathbf{A}(\varepsilon) \rangle + b \langle \mathbf{B}(\varepsilon) \rangle$, если a и b не зависят от энергии ε .

Рассмотрим теперь частный случай, когда к образцу приложено только электрическое поле \mathbf{E} . Тогда $\Phi(\varepsilon_{\mathbf{k}}) = e \nabla(\phi_0) = -e \mathbf{E}$, причем этот вектор не зависит от энергии. Средняя скорость в этом случае равна

$$\langle \mathbf{v} \rangle = \left\langle \frac{\tau(\varepsilon)}{m(\varepsilon)} \Phi(\varepsilon) \right\rangle = \left\langle \frac{\tau(\varepsilon)}{m(\varepsilon)} \right\rangle (-e \mathbf{E}), \quad (3.22)$$

а плотность тока

$$\mathbf{j} = e^2 \left\langle \frac{\tau(\varepsilon)}{m(\varepsilon)} \right\rangle n \mathbf{E}. \quad (3.23)$$

Сравнивая это выражение с законом Ома в форме $\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}$, находим, что $\sigma = e^2 \langle \tau(\varepsilon) / m(\varepsilon) \rangle n$.

В общем случае, если в образце кроме электрического поля есть еще и градиенты температуры и химпотенциала, плотность тока равна

$$\mathbf{j} = e^2 \left\langle \frac{\tau(\varepsilon)}{m(\varepsilon)} \right\rangle n [-\nabla(\phi_0 - \mu/e)] + e \left\langle \frac{\tau(\varepsilon)}{m(\varepsilon)} \frac{\varepsilon - \mu}{T} \right\rangle n \nabla T. \quad (3.24)$$

Аналогично, для потока тепла получим

$$\mathbf{q} = -e \left\langle \frac{\tau(\varepsilon)}{m(\varepsilon)} (\varepsilon - \mu) \right\rangle n [-\nabla(\phi_0 - \mu/e)] - \left\langle \frac{\tau(\varepsilon)}{m(\varepsilon)} \frac{(\varepsilon - \mu)^2}{T} \right\rangle n \nabla T. \quad (3.25)$$

Из феноменологической теории явлений переноса известно, что потоки тепла и заряда определяются коэффициентами электропроводности σ , термоэдс α и теплопроводности κ :

$$\begin{cases} \mathbf{j} = \sigma [-\nabla(\phi_0 - \mu/e)] - \alpha \sigma [\nabla T] \\ \mathbf{q} = \alpha \sigma T [-\nabla(\phi_0 - \mu/e)] - (\kappa + \alpha^2 \sigma T) [\nabla T] \end{cases} \quad (3.26)$$

Сравнивая (3.24), (3.25) с (3.26), получаем выражения для:
электропроводности

$$\sigma = e^2 \left\langle \frac{\tau(\varepsilon)}{m(\varepsilon)} \right\rangle n, \quad (3.27)$$

термоэдс

$$\alpha = -\frac{k_B}{e} \left\{ \frac{\langle \tau(\varepsilon) (\varepsilon / k_B T) / m(\varepsilon) \rangle}{\langle \tau(\varepsilon) / m(\varepsilon) \rangle} - \frac{\mu}{k_B T} \right\}, \quad (3.28)$$

электронной теплопроводности

$$\kappa = k_B^2 T n \left\{ \left\langle \tau(\varepsilon) (\varepsilon / k_B T)^2 / m(\varepsilon) \right\rangle - \frac{\langle \tau(\varepsilon) (\varepsilon / k_B T) / m(\varepsilon) \rangle^2}{\langle \tau(\varepsilon) / m(\varepsilon) \rangle} \right\}. \quad (3.29)$$

3.2. КИНЕТИЧЕСКИЕ КОЭФФИЦИЕНТЫ ДВУМЕРНОГО ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА

Рассмотрим теперь достаточно тонкую пленку толщиной a , в которой движение электронов квантуется в направлении поперек пленки, а в плоскости электроны могут двигаться свободно. Энергетический спектр электронов в такой системе задается выражением

$$\varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}, n} = \varepsilon_n + \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m_{\parallel}}, \quad (3.30)$$

где ε_n – положение дна n -ой подзоны размерного квантования, m_{\parallel} – составляющая тензора эффективной массы, \mathbf{k}_{\parallel} – волновой вектор,

соответствующие движению в плоскости пленки. Будем считать, что пленка достаточно тонкая. В этом случае энергетическое расстояние между минимумами соседних подзон размерного квантования велико, так что при не слишком высоких концентрациях и температурах заполнена только нижняя подзона размерного квантования, которая и дает основной вклад в явления переноса. Тогда для плотности тока и потока тепла в плоскости слоя можно записать

$$\mathbf{j}_{\parallel} = -2 \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} e \mathbf{v}_{\mathbf{k}_{\parallel},1} f_1(\mathbf{k}_{\parallel},1), \quad (3.31)$$

$$\mathbf{q}_{\parallel} = 2 \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} (\varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel},1} - \mu) \mathbf{v}_{\mathbf{k}_{\parallel},1} f_1(\mathbf{k}_{\parallel},1). \quad (3.32)$$

Неравновесную добавку к функции распределения можно записать аналогично случаю объемного образца, используя формулы (3.8), (3.9),

$$f_1(\mathbf{k}_{\parallel}) = \left(- \frac{\partial f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}})}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}}} \right) (\mathbf{v}_{\mathbf{k}_{\parallel}} \cdot \mathbf{\Phi}(\varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}})) \tau_{2D}(k_{\parallel}), \quad (3.33)$$

где волновой вектор электрона \mathbf{k}_{\parallel} и вектор обобщенной силы $\mathbf{\Phi}(\varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}})$ лежат в плоскости пленки, а $\tau_{2D}(k_{\parallel})$ – время релаксации электронов в пленке, которое, вообще говоря, отличается от времени релаксации в объемном образце.

Концентрация электронов в пленке с учетом заполнения только нижней подзоны размерного квантования, рассчитанная на единицу объема пленки равна

$$n_{2D} = \frac{2}{V} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}}) = \frac{1}{a} \int_0^{\infty} f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}}) \frac{k_{\parallel} dk_{\parallel}}{\pi} = \int_0^{\infty} f_0(\varepsilon) g_{2D}(\varepsilon) d\varepsilon, \quad (3.34)$$

где объем пленки $V = S a$, а плотность состояний в нижней подзоне размерного квантования

$$g_{2D}(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi a} \frac{\partial k_{\parallel}^2(\varepsilon)}{\partial \varepsilon}. \quad (3.35)$$

Проведя в (3.34) интегрирование по частям, получим:

$$n_{2D} = \frac{1}{2\pi a} \int_0^{\infty} \left(-\frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) k_{\parallel}^2(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (3.36)$$

Как и в трехмерном случае, введем символ усреднения. Для этого снова вычислим среднюю скорость электронов в плоскости пленки, используя (3.16) и (3.31), (3.33)

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{v}_{\parallel} \rangle &= \frac{2}{n_{2D} V} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} \mathbf{v}_{\mathbf{k}_{\parallel}} f_1(\mathbf{k}_{\parallel}) = \frac{2}{n_{2D} V} \int \mathbf{v}_{\mathbf{k}_{\parallel}} f_1(\mathbf{k}_{\parallel}) \frac{S d^2 \mathbf{k}_{\parallel}}{(2\pi)^2} = \\ &= \frac{1}{2\pi^2 a n_{2D}} \int_0^{2\pi} \left\{ \begin{array}{l} \cos \phi \\ \sin \phi \end{array} \right\} \cos \phi d\phi \int_0^{\infty} k_{\parallel} dk_{\parallel} \left[\left(-\frac{\partial f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}})}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}}} \right) \tau_{2D}(k) v_{\mathbf{k}_{\parallel}}^2 \Phi(\varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}}) \right]. \end{aligned} \quad (3.37)$$

Здесь угол ϕ в плоскости пленки отсчитывается от направления вектора $\Phi(\varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}})$. Интегрирование по углу ϕ дает вектор $\pi\{1, 0\}$, поэтому

$$\langle \mathbf{v}_{\parallel} \rangle = \frac{1}{2\pi a n_{2D}} \int_0^{\infty} \left(-\frac{\partial f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}})}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}}} \right) \tau_{2D}(k) v_{\mathbf{k}_{\parallel}}^2 \Phi(\varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}}) k_{\parallel} dk_{\parallel}. \quad (3.38)$$

Перейдя к интегрированию по энергии, получим

$$\langle \mathbf{v}_{\parallel} \rangle = \frac{1}{2\pi a n_{2D}} \int_0^{\infty} \left(-\frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) \frac{\tau_{2D}(\varepsilon)}{m_{\parallel}(\varepsilon)} \Phi(\varepsilon) k_{\parallel}^2(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (3.39)$$

Таким образом, символ усреднения определяется в двумерном случае следующим образом

$$\langle \mathbf{A}(\varepsilon) \rangle = \frac{1}{2\pi a n_{2D}} \int_0^{\infty} \left(-\frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) \mathbf{A}(\varepsilon) k_{\parallel}^2(\varepsilon) d\varepsilon = \frac{\int_0^{\infty} \left(-\frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) \mathbf{A}(\varepsilon) k_{\parallel}^2(\varepsilon) d\varepsilon}{\int_0^{\infty} \left(-\frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) k_{\parallel}^2(\varepsilon) d\varepsilon}. \quad (3.40)$$

Используя это определение для символа усреднения, легко получить формулы для плотности тока и потока тепла в плоскости пленки аналогично (3.24), (3.25). Электропроводность, термоэдс и электронную теплопроводность можно рассчитать по формулам (3.27) – (3.29), в которых в качестве символа усреднения используется (3.40), а τ , m и n надо заменить, соответственно, на τ_{2D} , m_{\parallel} и n_{2D} .

Особенности в поведении кинетических коэффициентов в квантовых ямах связаны с одновременным изменением плотности состояний и вероятности рассеяния электронов. Рассмотрим электрический квантовый предел, когда вклад в перенос дают носители только из нижней подзоны размерного квантования. Рассмотрим, например, такой важный механизм рассеяния, как рассеяние на акустических фононах. Если механические свойства слоев квантовой ямы и барьеров близки, то спектр длинноволновых акустических колебаний меняется слабо. Поэтому чаще всего рассматривается рассеяние электронов на объемных акустических фононах.

В случае, когда стенки потенциальной ямы являются непроницаемыми, электрон оказывается локализованным в области пространства с размером a . В соответствии с принципом Гейзенберга

это приводит к неопределенности импульса электрона в направлении оси z , перпендикулярной слою квантовой ямы, порядка \hbar/a . В результате, при рассеянии электронов на объемных акустических фононах закон сохранения квазиимпульса фонона в направлении оси z выполняется не точно, а с неопределенностью $\sim \hbar/a$. Это увеличивает число фононов, которые могут принимать участие в актах рассеяния, и приводит к росту вероятности рассеяния. Можно показать, что вероятность рассеяния в упругом приближении принимает вид

$$W^{\pm}(\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{q}_{\parallel}, q_x) = \frac{2\pi}{\hbar} |M(q_{\parallel})|^2 |G(q_z)|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel} \mp \mathbf{q}_{\parallel}} - \varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}}), \quad (3.41)$$

где знаки \pm соответствуют испусканию и поглощению фонона с волновым вектором $\mathbf{q} = (\mathbf{q}_{\parallel}, q_z)$.

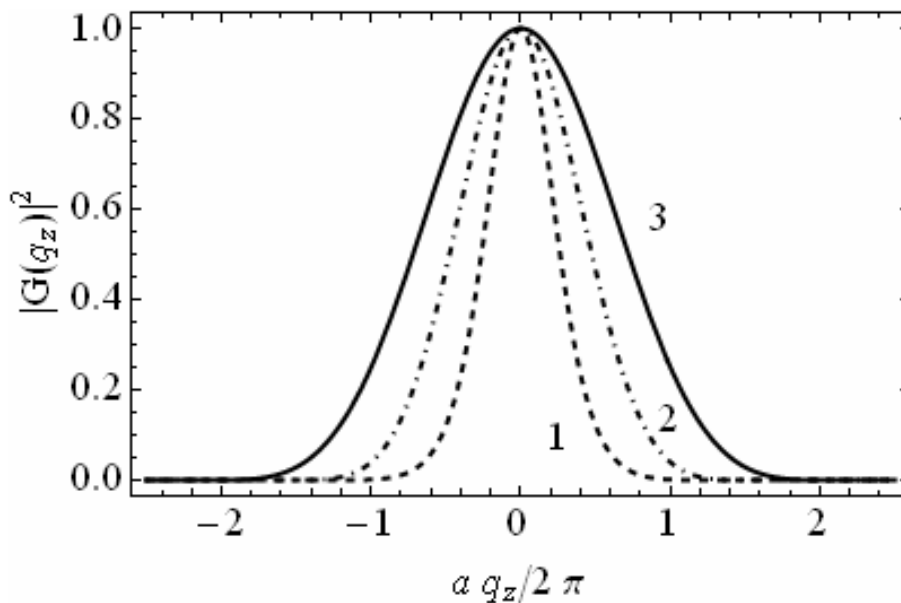


Рис. 3.1. Вид форм-фактора $|G(q_z)|^2$ для квантовых ям.

Приведены данные для квантовых ям, ограниченных барьером различной высоты $U_0 = 0,2$ эВ (1), 1 эВ (2) и $U_0 \rightarrow \infty$ (3). В расчетах было принято $m = 0,1m_0$, $a = 30 \text{ \AA}$

При этом оказывается, что матричный элемент рассеяния $M(q_{\parallel})$ (ср. (1.73, a)) не зависит от волнового вектора фонона и в точности совпадает с матричным элементом для объемного образца. Отличие вероятности рассеяния в квантовой яме заключается в появлении интеграла перекрытия $G(q_z)$ (1.75), называемого также форм-фактором. Он связан с нарушением закона сохранения импульса вдоль оси z ; его график имеет вид колоколообразной кривой, изображенной на рис. 3.1.

Это увеличение вероятности рассеяния в случае квантовых ям с непроницаемыми стенками приводит к тому, что время релаксации уменьшается по сравнению с объемным значением при уменьшении толщины ямы a :

$$\frac{\tau_{2D}}{\tau_{3D}} = \frac{2ka}{3\pi}. \quad (3.42)$$

Если же квантовая яма ограничена потенциальным барьером конечной высоты, то волновая функция электрона вне ямы отлична от нуля, то есть область локализации электрона увеличивается. Это приводит к уменьшению неопределенности его импульса и сужению форм-фактора (см. рис. 3.1). В результате, вероятность рассеяния становится меньше по сравнению с квантовыми ямами с непроницаемыми стенками. В этом случае зависимости времени релаксации и подвижности от толщины квантовой ямы оказываются немонотонными (см. рис. 3.2).

Для других механизмов рассеяния эта зависимость может несколько измениться. Так, например, для полярного рассеяния на объемных оптических фононах оказывается, что матричный элемент рассеяния уменьшается с ростом импульса фонона. Это ослабляет действие форм-фактора $G(q_z)$ и приводит к тому, что даже в квантовой яме с непроницаемыми стенками подвижность сначала

убывает с уменьшением толщины ямы, а затем, в области малых a , начинает возрастать.

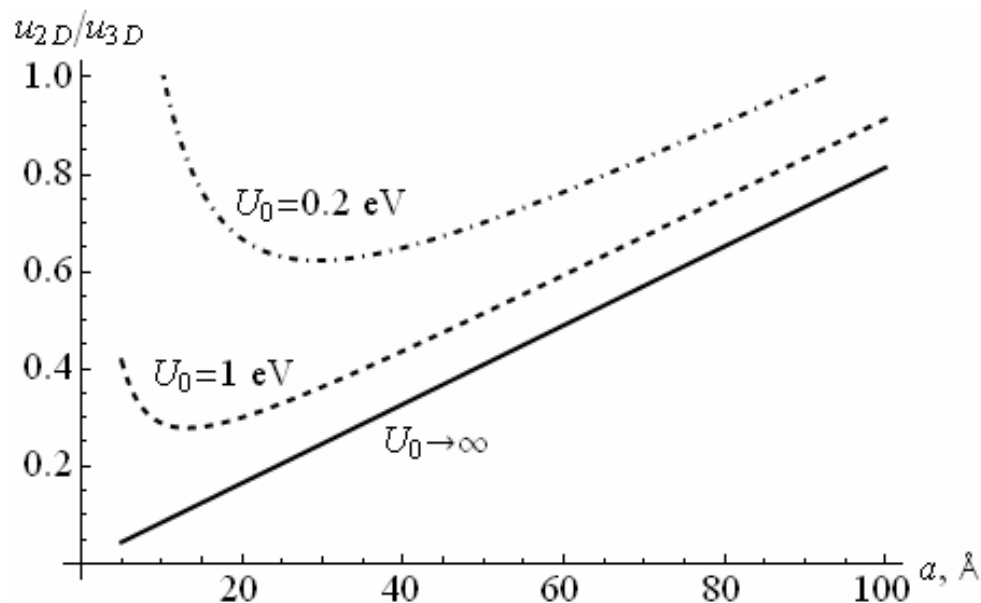


Рис. 3.2. Изменение подвижности при акустическом рассеянии в квантовой яме по сравнению с объемным образцом в зависимости от толщины ямы для разных значений U_0 . Химпотенциал в каждом случае равен $\mu = 0$, эффективная масса электрона $m = 0,1 m_0$

Рассмотрим теперь коэффициент термоэдс. Увеличение плотности состояний в квантовых ямах приводит к тому, что при одинаковой концентрации положение уровня химпотенциала относительно дна подзоны оказывается ниже, чем в объемном образце. В результате, при одной и той же объемной концентрации носителей коэффициент термоэдс оказывается выше, чем в объемном образце (см. рис. 3.3).

Материалы с большими значениями коэффициента термоэдс и высокой электропроводностью используются в термоэлектрических преобразователях энергии. В 1993 г. Хикс и Дрессельхауз из Массачусетского технологического института предсказали увеличение КПД термоэлектрических преобразователей за счет эффекта увеличения плотности состояний в квантоворазмерных

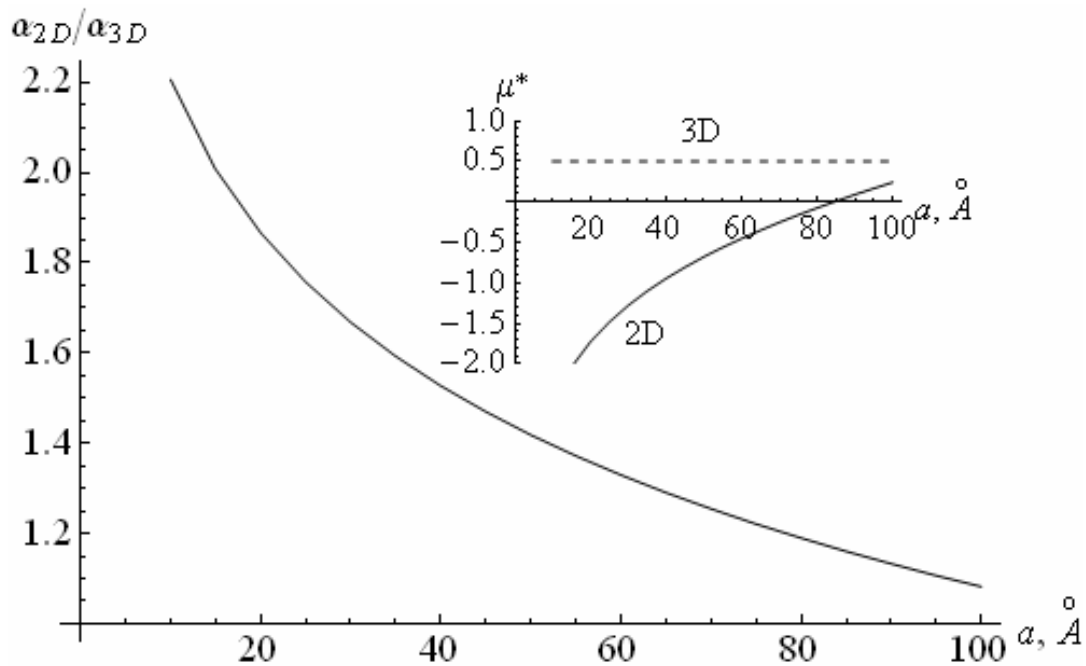


Рис. 3.3. Изменение коэффициента термоэдс в квантовой яме с непроницаемыми стенками в зависимости от ее толщины по отношению к случаю объемного образца.

Данные приведены для постоянной концентрации носителей, соответствующей $\mu_{3D} = 0,5 k_B T$. На вставке показана зависимость химпотенциала от толщины ямы

структурах. В первых расчетах считалось, что время релаксации не зависит от энергии и остается таким же, как и в объемном образце. При этом был предсказан многократный выигрыш в термоэлектрической эффективности наноструктур. В последствии выяснилось, что увеличение вероятности рассеяния в некоторых случаях способно полностью скомпенсировать рост добротности за счет увеличения плотности состояний. Это, например, имеет место для акустического рассеяния в квантовых ямах с непроницаемыми стенками. В этом случае с уменьшением толщины ямы a плотность состояний растет, $g_{2D}/g_{3D} \sim 1/(ak)$, а время релаксации уменьшается: $\tau_{2D}/\tau_{3D} \sim ak$. Интересно, что в этом случае оба эффекта компенсируют друг друга, и электропроводность, термоэдс и электронная теплопроводность оказываются одинаковыми в

квантовой яме и в объемном образце. Таким образом, в этом частном случае выигрыш в термоэлектрической эффективности отсутствует. Тем не менее, как было показано позднее рядом авторов, при полярном рассеянии на оптических фононах возможно увеличение термоэлектрической эффективности в наноструктурах, хотя и не такое сильное, как предсказывалось ранее. Экспериментальное подтверждение было дано в 1996 г. Харманом, которому удалось добиться повышения термоэлектрической эффективности по сравнению с объемным образцом в квантовых ямах из PbTe, ограниченных барьерами из PbEuTe. Подвижность носителей за счет модулированного легирования удалось сохранить на уровне значений, характерных для объемного образца, а коэффициент термоэдс возрос за счет роста плотности состояний. В результате, при одинаковой концентрации увеличился фактор мощности термоэлектрического преобразователя $\alpha^2 \sigma$, а с ним и термоэлектрическая эффективность.

3.3. КИНЕТИЧЕСКИЕ КОЭФФИЦИЕНТЫ ПЕРИОДИЧЕСКОЙ СВЕРХРЕШЕТКИ

В случае двумерного электронного газа носители движутся только вдоль слоев пленки. Такая ситуация может возникнуть при рассмотрении не только отдельной пленки, но и слоистой структуры из двух материалов с различной шириной запрещенной зоны. При этом носители, образующие двумерный электронный газ, сосредоточены в одном из слоев, а соседние слои образуют энергетический барьер, затрудняющий движение электронов поперек слоев. Если ширина или высота этого барьера велика, то носители могут двигаться практически только в плоскости слоев, и реализуется случай, описанный выше. При уменьшении толщин барьерных слоев перекрытие волновых функций электронов в соседних потенциальных ямах растет, что приводит к образованию минизон,

каждая из которых порождается соответствующим квантовым уровнем в яме. При этом возникает возможность движения электронов вдоль оси сверхрешетки по минизонам.

Рассмотрим ситуацию, при которой основной вклад в перенос дает нижняя минизона. Это возможно, если потенциальные барьеры достаточно узкие для образования минизон, но относительно высокие, так что соседние по энергии минизоны не перекрываются. Концентрация носителей и температура также должны быть не слишком велики, чтобы можно было пренебречь заполнением минизон, лежащих выше по энергии, и их вкладом в явления переноса. Если в объемном материале закон дисперсии электронов был изотропным и параболическим, то в сверхрешетке он будет описываться следующим выражением:

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}_{\parallel}^2}{2m_{\parallel}} + \gamma_1 (1 - \cos(d k_z)), \quad (3.43)$$

где \mathbf{k}_{\parallel} – составляющая волнового вектора \mathbf{k} в плоскости слоев, k_z – составляющая в направлении оси сверхрешетки, d – период сверхрешетки, γ_1 – энергетическая полуширина минизоны; энергия электрона отсчитывается от дна минизоны.

В такой системе существенна анизотропия ее свойств, обусловленная как анизотропией спектра энергии, так и анизотропией рассеяния. Для анизотропного рассеяния в приближении времени релаксации необходимо использовать вместо одной величины τ тензор времени релаксации $\hat{\tau}$. Решение кинетического уравнения Больцмана в этом случае дает следующее выражение для неравновесной добавки к функции распределения [9]:

$$f_1(\mathbf{k}) = \left(-\frac{\partial f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}})}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right) (\mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \hat{\tau}(\mathbf{k}) \Phi(\varepsilon_{\mathbf{k}})). \quad (3.44)$$

В сверхрешетке, как было показано Аскеровым в 1977 г., тензор времени релаксации при рассеянии на фононах различного типа содержит две независимые компоненты

$$\tau_i^{-1}(\mathbf{k}) = A_r \frac{g_{SL}(\varepsilon)}{(k_i k_{\parallel})^r}, \quad (3.45)$$

где индекс i соответствует двум возможным направлениям – вдоль оси сверхрешетки ($k_i = k_z$) и в плоскости слоев ($k_i = k_{\parallel}$), параметр $r = 0$ для акустического рассеяния или рассеяния на неполярных оптических фононах и $r = 1$ для рассеяния на полярных оптических и пьезоакустических фононах. Константы A_r для каждого типа рассеяния выписаны в [9], а плотность электронных состояний в сверхрешетке $g_{SL}(\varepsilon)$, отнесенную к единице ее объема, можно найти, используя формулу (3.43):

$$g_{SL}(\varepsilon) = \frac{m_{\parallel}}{\pi \hbar^2 d} \begin{cases} \arcsin(\varepsilon/\gamma_1 - 1)/\pi + 1/2, & 0 < \varepsilon < 2\gamma_1 \\ 1, & \varepsilon > 2\gamma_1 \end{cases}. \quad (3.46)$$

С учетом выражения (3.45) для компонент тензора времени релаксации, неравновесная добавка к функции распределения может быть записана в виде

$$f_1(\mathbf{k}) = \left(-\frac{\partial f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}})}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right) \sum_i \tau_i(\mathbf{k}) v_{i\mathbf{k}} \Phi_i(\varepsilon_{\mathbf{k}}). \quad (3.47)$$

Тогда для средней скорости носителей можно записать

$$\langle \mathbf{v} \rangle = \frac{2}{n_{SL} V} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}, k_z} \mathbf{v}_{\mathbf{k}} f_1(\mathbf{k}) = \frac{2}{n_{SL} V} \int \mathbf{v}_{\mathbf{k}} f_1(\mathbf{k}) \frac{V d^2 \mathbf{k}_{\parallel} dk_z}{(2\pi)^3} =$$

$$= \frac{m_{\parallel}}{4\pi^3 \hbar^2 n_{SL}} \int_{-\pi/d}^{\pi/d} dk_z \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\infty} d\varepsilon_{\parallel} \left[\left(-\frac{\partial f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}})}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right) \sum_i \mathbf{e}_i \tau_i(\mathbf{k}) v_{i\mathbf{k}}^2 \Phi_i(\varepsilon_{\mathbf{k}}) \right], \quad (3.48)$$

где ε_{\parallel} – энергия, соответствующая движению в плоскости слоя, \mathbf{e}_i – орт соответствующей оси.

Для того чтобы ввести соответствующий символ усреднения, удобно переписать выражение для концентрации в виде

$$\begin{aligned} n_{SL} &= \frac{2}{V} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}, k_z} f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}}) = \frac{m_{\parallel}}{4\pi^3 \hbar^2} \int_{-\pi/d}^{\pi/d} dk_z \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\infty} f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}}) d\varepsilon_{\parallel} = \\ &= \frac{m_{\parallel}}{4\pi^3 \hbar^2} \int_{-\pi/d}^{\pi/d} dk_z \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\infty} d\varepsilon_{\parallel} \left[\left(-\frac{f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}})}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right) \varepsilon_{\parallel} \right]. \end{aligned} \quad (3.49)$$

Из (3.48) и (3.49) видно, что символ усреднения в данном случае можно ввести следующим образом

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &= \frac{m_{\parallel}}{4\pi^3 \hbar^2 n_{SL}} \int_{-\pi/d}^{\pi/d} dk_z \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\infty} d\varepsilon_{\parallel} \left[\left(-\frac{\partial f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}})}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right) A(\varepsilon) \varepsilon_{\parallel} \right] = \\ &= \frac{\int_{-\pi/d}^{\pi/d} dk_z \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\infty} d\varepsilon_{\parallel} \left[\left(-\frac{\partial f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}})}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right) A(\varepsilon) \varepsilon_{\parallel} \right]}{\int_{-\pi/d}^{\pi/d} dk_z \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^{\infty} d\varepsilon_{\parallel} \left[\left(-\frac{\partial f_0(\varepsilon_{\mathbf{k}})}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}} \right) \varepsilon_{\parallel} \right]}. \end{aligned} \quad (3.50)$$

Используя это выражение, для плотности тока можно записать

$$\mathbf{j} = -e \left\langle \sum_i \mathbf{e}_i \tau_i(\mathbf{k}) \frac{v_{i\mathbf{k}}^2}{\varepsilon_{\parallel}} \Phi_i(\varepsilon_{\mathbf{k}}) \right\rangle n_{SL}, \quad (3.51)$$

откуда видно, что компоненты тензора электропроводности равны

$$\sigma_i = e^2 \left\langle \tau_i(\mathbf{k}) v_{i\mathbf{k}}^2 / \varepsilon_{\parallel} \right\rangle n_{SL}. \quad (3.52)$$

Аналогичным образом получают выражения для термоэдс

$$\alpha_i = -\frac{k_B}{e} \left\{ \frac{\left\langle \tau_i(\mathbf{k}) v_{i\mathbf{k}}^2 (\varepsilon / k_B T) / \varepsilon_{\parallel} \right\rangle}{\left\langle \tau_i(\mathbf{k}) v_{i\mathbf{k}}^2 / \varepsilon_{\parallel} \right\rangle} - \frac{\mu}{k_B T} \right\} \quad (3.53)$$

и электронной теплопроводности

$$\kappa_i = k_B^2 T n_{SL} \left\{ \left\langle \tau_i(\mathbf{k}) v_{i\mathbf{k}}^2 (\varepsilon / k_B T)^2 / \varepsilon_{\parallel} \right\rangle - \frac{\left\langle \tau_i(\mathbf{k}) v_{i\mathbf{k}}^2 (\varepsilon / k_B T) / \varepsilon_{\parallel} \right\rangle^2}{\left\langle \tau_i(\mathbf{k}) v_{i\mathbf{k}}^2 / \varepsilon_{\parallel} \right\rangle} \right\}. \quad (3.54)$$

Интересно сравнить подвижность носителей в направлении оси сверхрешетки и вдоль плоскости слоев. Сделаем это для случая рассеяния на акустических и оптических фононах, когда вклад в проводимость дает только нижняя минизона. Например, для эффективной массы $m = 0,1m_0$ и высоты барьеров $\varepsilon_b = 0,5$ эВ энергетический спектр сверхрешетки с одной и той же толщиной ям и барьеров, равной $d/2$, изображен на рис. 3.4.

Для периодов $d = 40 \text{ \AA}$ и 30 \AA оценки дают ширину первой минизоны $0,11 \text{ эВ}$ и $0,28 \text{ эВ}$, что при комнатной температуре составляет $4,4 k_B T$ и $10,8 k_B T$, соответственно. В обоих случаях энергетическое расстояние до второй минизоны составляет больше $10 k_B T$.

Используя время релаксации из (3.45) и выражение для электропроводности (3.52), получим отношение подвижностей электронов в плоскости слоев u_{\parallel} и в направлении оси сверхрешетки u_z :

$$\frac{u_{\parallel}}{u_z} = \left(\frac{2 m_{\parallel} k_B T}{\hbar^2 (\pi/d)^2} \right)^{r/2} \frac{\hbar^2 k_B T}{m_{\parallel} \gamma_1^2 d^2} \frac{\int_0^1 d\xi \int_0^{\infty} dx \left[\left(-\frac{\partial f_0(X)}{\partial X} \right) \frac{x^{r+1}}{g_{SL}(X)} \right]}{\int_0^1 d\xi \int_0^{\infty} dx \left[\left(-\frac{\partial f_0(X)}{\partial X} \right) \frac{\xi^r x^{r/2}}{g_{SL}(X)} \sin^2(\pi \xi) \right]}, \quad (3.55)$$

где $X = \varepsilon_{\mathbf{k}} / (k_B T)$, $x = \hbar^2 k_{\parallel}^2 / (2 m_{\parallel} k_B T)$, $\xi = k_z / (\pi / d)$.

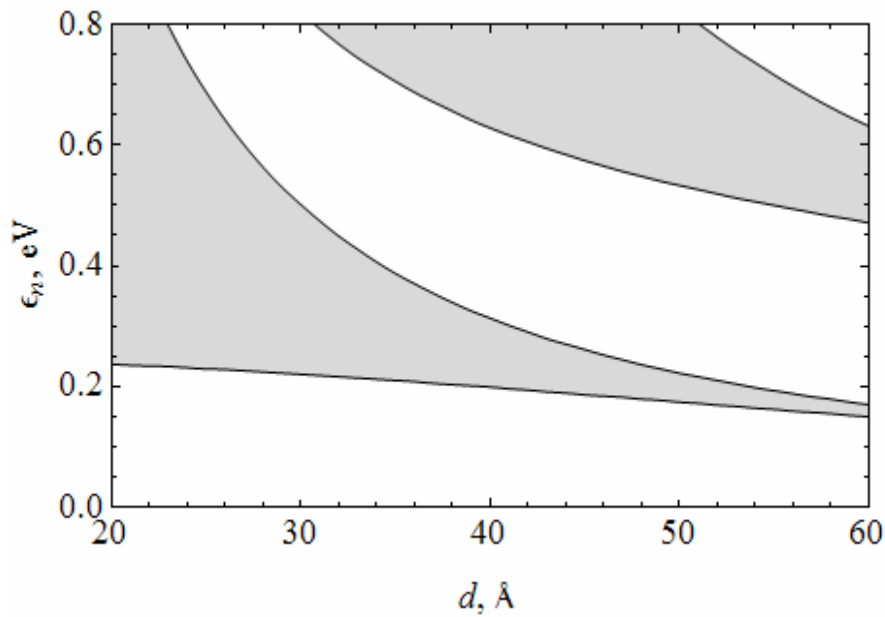


Рис. 3.4. Энергетический спектр сверхрешетки в зависимости от периода при одинаковой толщине ям и барьеров для $m = 0,1 m_0$ и $\varepsilon_b = 0,5$ эВ

На рис. 3.5 приведена зависимость анизотропии подвижности от уровня химпотенциала. Из рис. 3.5 видно, что анизотропия увеличивается с ростом химпотенциала особенно резко, когда уровень химпотенциала пересекает потолок минизоны. Это наиболее легко понять для вырожденного случая, когда усреднение сводится к тому, что все величины берутся при значениях энергии, равных μ . Когда $\mu > 2\gamma_1$, плотность состояний перестает меняться, поэтому усреднение (3.52) дает $u_{\parallel}/u_z \sim \mu^{r+1/2}$. Анизотропия подвижности при акустическом рассеянии относительно ниже, чем при полярном

оптическом рассеянии, что связано с анизотропией времени релаксации. Интересно, что для более широкой минизоны при малых μ , когда вклад в перенос дают состояния вблизи дна минизоны, подвижность для акустического рассеяния в направлении оси сверхрешетки оказывается выше, чем в плоскости слоев. Это связано с тем, что вблизи дна минизоны спектр в направлении оси z близок к параболическому с эффективной массой $m_{z0} = \hbar^2 / \gamma_1 d^2$, которая для широкой минизоны в данном примере равна $0,06 m_0$, то есть меньше эффективной массы в плоскости слоев.

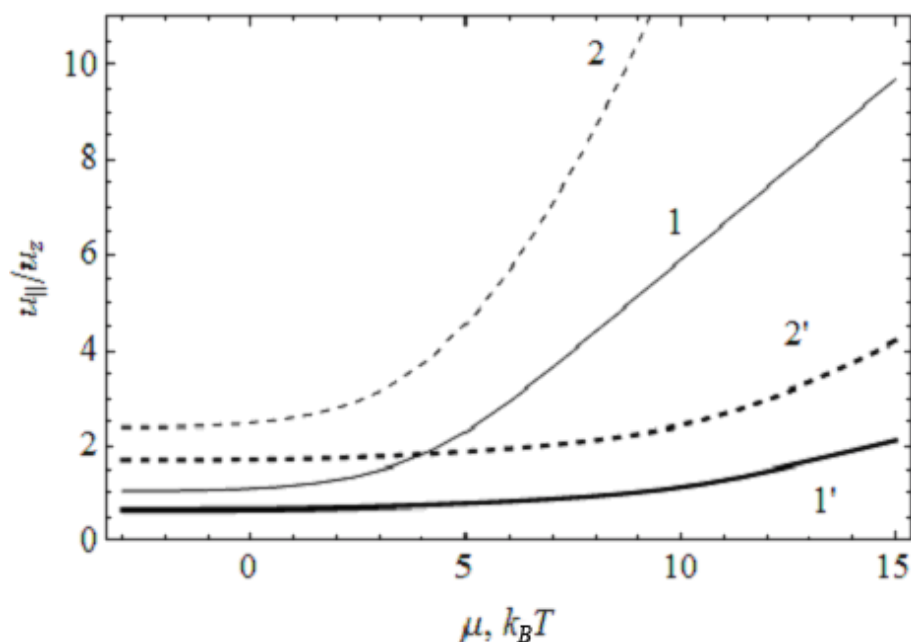


Рис. 3.5. Зависимость анизотропии подвижности в сверхрешетке от уровня химпотенциала для акустического рассеяния (1, 1') и полярного оптического рассеяния (2, 2'). Ширина минизоны $2\gamma_1 = 4,4 k_B T$ (1, 2) и $10,8 k_B T$ (1', 2')

Другой эффект, который имеет место в сверхрешетках, заключается в появлении особенностей на концентрационной зависимости термоэдс. На рис. 3.6 приведена зависимость термоэдс от уровня химпотенциала. Наличие минизон конечной ширины в энергетическом спектре сверхрешеток приводит к тому, что при

значениях химпотенциала, близких к $2\gamma_1$, термоэдс в плоскости слоев уменьшается, а термоэдс в направлении оси сверхрешетки может даже изменить знак.

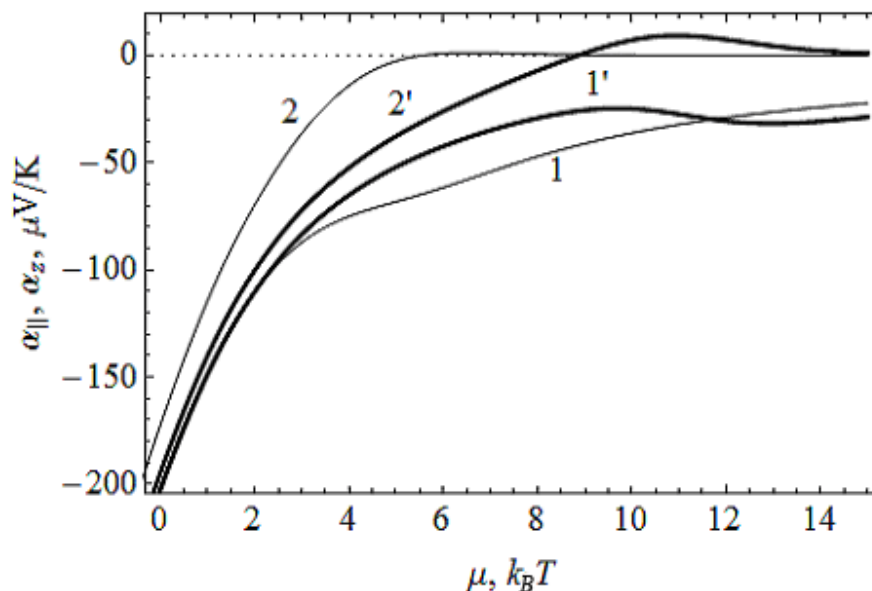


Рис. 3.6. Зависимость термоэдс в сверхрешетке от уровня химпотенциала для акустического рассеяния: (1, 1') – $\alpha_{||}$, (2, 2') – α_z .
Ширина минизоны $2\gamma_1 = 4,4k_B T$ (1, 2) и $10,8k_B T$ (1', 2')

3.4. РАССЕЙНИЕ ЭЛЕКТРОНОВ НА ИОНАХ ПРИМЕСИ В КВАНТОВЫХ ЯМАХ

При комнатной температуре доминирующим механизмом рассеяния является рассеяние на фононах. При понижении температуры число фононов уменьшается, уменьшается вероятность этого типа рассеяния, и более важную роль начинает играть рассеяние на разнообразных дефектах, таких как заряженные и нейтральные примеси, а также рассеяние на границах поликристаллов или шероховатостях поверхностей раздела между различными слоями в сверхрешетке.

Рассмотрим подвижность электронов в квантовых ямах при низких температурах, считая, что основным фактором, который ее

ограничивает, является рассеяние на ионах примесей, то есть – на примесных центрах, обладающих электрическим зарядом. При этом в слоистой структуре с квантовыми ямами появляется возможность уменьшать интенсивность данного типа рассеяния, используя модулированное легирование. Поскольку электроны локализованы в слоях, образующих квантовую яму, можно при выращивании сверхрешетки внедрять легирующую примесь в барьерные слои, пространственно разделяя примесные рассеивающие центры и носители заряда. Это позволяет получать высокие значения подвижностей при низких температурах.

Время релаксации для рассеяния на ионах примесей можно рассчитать по общей формуле (3.7). Напомним, что она записана в предположении, что основной вклад в проводимость дают электроны из нижней зоны размерного квантования. При этом рассеяние происходит в основном внутри подзоны, а его вероятность равна

$$W(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}). \quad (3.56)$$

Матричный элемент $M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$, входящий в это выражение, равен

$$M_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \langle \mathbf{k}' | U_t(\mathbf{r}) | \mathbf{k} \rangle = \int_V \psi_{\mathbf{k}'}^*(\mathbf{r}) U_t(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}, \quad (3.57)$$

где $U_t(\mathbf{r})$ – полная потенциальная энергия взаимодействия электрона с примесным ионом с учетом экранирования.

Напомним вкратце, как выглядит экранированный потенциал в объемном образце. Если рассматривать в качестве исходного потенциала кулоновский потенциал заряженного иона в среде с диэлектрической проницаемостью ε_0

$$U_c(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{\varepsilon_0 r}, \quad (3.58)$$

то экранирование свободными носителями приводит к тому, что исходный потенциал необходимо заменить потенциалом Юкавы,

$$U_t(\mathbf{r}) = -\frac{e^2}{\varepsilon_0 r} e^{-r/r_0}, \quad (3.59)$$

где r_0 – радиус экранирования:

$$r_0^{-2} = \frac{4\pi e^2}{\varepsilon_0} \int_0^\infty \left(-\frac{\partial f_0(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} \right) g(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (3.60)$$

Если выбрать волновые функции электрона в объемном образце в виде плоских волн,

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}, \quad (3.61)$$

то матричный элемент потенциала будет равен его фурье-образу:

$$M_t(q) = \frac{1}{V} \frac{4\pi e^2}{\varepsilon_0 (q^2 + r_0^{-2})}. \quad (3.62)$$

Матричный же элемент исходного кулоновского потенциала получится из (3.62), если устремить r_0 к бесконечности.

Для вычисления времени релаксации в объемном образце надо учесть рассеяние на всех примесных центрах. Если их концентрация не слишком велика, так что рассеяние на различных примесных ионах происходит независимо, то полную вероятность рассеяния можно получить, просуммировав вероятности рассеяния на каждом из

атомов. Это суммирование при однородном распределении примеси приводит просто к необходимости умножить вероятность рассеяния на концентрацию примеси. Время релаксации в этом случае равно

$$\tau^{-1}(\varepsilon) = \frac{\pi e^4 N_i F_i(\varepsilon)}{\varepsilon_0^2 \sqrt{2m} \varepsilon^{3/2}}, \quad (3.63)$$

где $F_i(k) = \ln(1 + \xi) - \xi/(1 + \xi)$, $\xi = (2kr_0)^2$.

Рассмотрим теперь рассеяние на кулоновском примесном потенциале в двумерных структурах. Начать необходимо с определения вида экранированного потенциала. Исходный неэкранированный потенциал $\phi_c(\mathbf{r})$ приводит к перераспределению электронов в пространстве, что нарушает локальную электронейтральность и создает индуцированный заряд, который приводит к возникновению индуцированного потенциала $\phi_{ind}(\mathbf{r})$, ослабляющего действие поля примеси $\phi_c(\mathbf{r})$. В результате, потенциальная энергия взаимодействия иона с электроном определяется суммарным воздействием неэкранированного и индуцированного потенциалов:

$$U_t(\mathbf{r}) = -e\phi_t(\mathbf{r}) = -e\phi_c(\mathbf{r}) - e\phi_{ind}(\mathbf{r}) = U_c(\mathbf{r}) + U_{ind}(\mathbf{r}). \quad (3.64)$$

Поэтому чтобы рассмотрение было самосогласованным, при расчете индуцированного заряда необходимо в качестве внешнего возмущающего воздействия сразу выбрать $U_t(\mathbf{r})$. Тогда индуцированный потенциал будет выражаться через $U_t(\mathbf{r})$, и из (3.64) можно будет выразить экранированный потенциал через исходный, затравочный.

Указанную процедуру проще всего проводить не с самими потенциалами, а с их матричными элементами. В этом случае матричный элемент потенциальной энергии $U_t(\mathbf{r})$ оказывается

пропорциональным матричному элементу исходного потенциала $U_c(\mathbf{r})$. В объемном случае матричный элемент $M_t(q)$ равен фурье-образу потенциала $U_t(\mathbf{r})$. Поэтому, проведя обратное преобразование Фурье, можно получить явное выражение для экранированного потенциала (3.59). В двумерном случае волновые функции электронов в нижней подзоне размерного квантования имеют вид

$$\Psi_{\mathbf{k}_{\parallel}}(\mathbf{r}) = \chi(z) \frac{e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \boldsymbol{\rho}}}{S}, \quad (3.65)$$

где $\chi(z)$ – составляющая волновой функции, связанная с размерным квантованием вдоль оси z . Для случая бесконечно глубокой потенциальной ямы она равна $\chi(z) = \sqrt{2/a} \sin(\pi z/a)$. Волновые функции (3.65) уже не являются плоскими волнами в трехмерном пространстве, а их матричные элементы не будут соответствующими фурье-образами. Поэтому, в отличие от трехмерного случая, проведя обратное преобразование Фурье в плоскости ямы, можно восстановить лишь зависимость усредненного потенциала от координаты ρ в плоскости слоя. Тем не менее, для вычисления подвижности в двумерном случае нам достаточно определить $M_t(q_{\parallel})$, что мы и сделаем ниже.

Для расчета потенциала экранирования найдем поправку к волновой функции электрона в квантовой яме (3.65), возникающую из-за воздействия потенциала $U_t(\mathbf{r})$. Будем считать это возмущение слабым и найдем возмущенную волновую функцию $\Psi_{\mathbf{k}_{\parallel}}^{(d)}$ с точностью до поправки первого порядка по теории возмущений, предполагая, что экранирование осуществляется только носителями из нижней подзоны размерного квантования:

$$\Psi_{\mathbf{k}_{\parallel}}^{(d)} = \Psi_{\mathbf{k}_{\parallel}} + \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}' \neq \mathbf{k}_{\parallel}} \frac{\langle \mathbf{k}' | U_t(\mathbf{r}) | \mathbf{k} \rangle}{\varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}}} \Psi_{\mathbf{k}_{\parallel}'}. \quad (3.66)$$

Квадрат модуля волновой функции определяет электронную плотность, поэтому, учитывая спиновое вырождение, плотность индуцированного заряда можно рассчитать следующим образом:

$$\rho_i(\mathbf{r}) = -2e \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} \left(|\psi_{\mathbf{k}_{\parallel}}^{(d)}|^2 - |\psi_{\mathbf{k}_{\parallel}}|^2 \right) f_0(\mathbf{k}_{\parallel}), \quad (3.67)$$

где функция распределения $f_0(\mathbf{k}_{\parallel})$ учитывает заполнение уровней энергии электронами. С точностью до поправок первого порядка можно переписать (3.67) в виде

$$\rho_i(\mathbf{r}) = -2e \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} \left(\psi_{\mathbf{k}_{\parallel}}^* \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}' \neq \mathbf{k}_{\parallel}} \frac{\langle \mathbf{k}' | U_t(\mathbf{r}) | \mathbf{k} \rangle}{\varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}}} \psi_{\mathbf{k}_{\parallel}'} + \psi_{\mathbf{k}_{\parallel}} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}' \neq \mathbf{k}_{\parallel}} \frac{\langle \mathbf{k}' | U_t(\mathbf{r}) | \mathbf{k} \rangle^*}{\varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}'} - \varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}}} \psi_{\mathbf{k}_{\parallel}'}^* \right) f_0(\mathbf{k}_{\parallel}). \quad (3.68)$$

Введем новую переменную $\mathbf{q}_{\parallel} = \mathbf{k}_{\parallel}' - \mathbf{k}_{\parallel}$ и заменим суммирование по \mathbf{k}_{\parallel}' на суммирование по \mathbf{q}_{\parallel} . После этого для второго слагаемого сделаем замены переменных \mathbf{q}_{\parallel} на $-\mathbf{q}_{\parallel}$ и \mathbf{k}_{\parallel} на $\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}$. В результате получим:

$$\begin{aligned} \rho_i(\mathbf{r}) &= -2e \sum_{\mathbf{q}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}} \frac{M_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}}^{(t)} (f_0(\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}) - f_0(\mathbf{k}_{\parallel}))}{\varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}} - \varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}}} \psi_{\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}} \psi_{\mathbf{k}_{\parallel}}^* = \\ &= -\frac{2e}{S} \chi^2(z) \sum_{\mathbf{q}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}} \frac{M_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}}^{(t)} (f_0(\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}) - f_0(\mathbf{k}_{\parallel}))}{\varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}} - \varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}}} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{q}_{\parallel}}. \end{aligned} \quad (3.69)$$

Потенциальную энергию взаимодействия электрона с индуцированным потенциалом в точке \mathbf{r} можно получить, просуммировав вклады от кулоновских потенциалов зарядов $\rho_i(\mathbf{r}')d^3\mathbf{r}'$, расположенных в точках \mathbf{r}' :

$$U_i(\mathbf{r}) = -\frac{e}{\varepsilon_0} \int \frac{\rho_i(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3\mathbf{r}' . \quad (3.70)$$

Поскольку в выражение для $\rho_i(\mathbf{r})$ входит волновая функция $\chi(z)$, интегрирование в (3.70) ведется только по области пространства, в которой она отлична от нуля.

Подставляя (3.69) в (3.70), получим:

$$\begin{aligned} U_i(\mathbf{r}) &= \frac{2}{S} \sum_{\mathbf{q}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}} \frac{M_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}}^{(t)} (f_0(\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}) - f_0(\mathbf{k}_{\parallel}))}{\varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}} - \varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}}} \int \psi_{\mathbf{k}_{\parallel}}^*(\mathbf{r}') \frac{e^2}{\varepsilon_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \psi_{\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}}(\mathbf{r}') d^3\mathbf{r}' = \\ &= \frac{2}{S} \sum_{\mathbf{q}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}} \frac{M_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}}^{(t)} (f_0(\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}) - f_0(\mathbf{k}_{\parallel}))}{\varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}} - \varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}}} M_{\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}}^{(c)}(\mathbf{r}) . \end{aligned} \quad (3.71)$$

Используя разложение для кулоновского потенциала в двумерный ряд Фурье,

$$\frac{e^2}{\varepsilon_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \sum_{\mathbf{q}_{\parallel}'} \left\{ \frac{2\pi e^2}{S \varepsilon_0 q_{\parallel}'} e^{-i\mathbf{q}_{\parallel}' \cdot \boldsymbol{\rho}'} e^{-q_{\parallel}' |z - z'|} \right\} e^{i\mathbf{q}_{\parallel}' \cdot \boldsymbol{\rho}} , \quad (3.72)$$

имеем:

$$\begin{aligned}
M_{\mathbf{k}_{\parallel}+\mathbf{q}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}}^{(c)}(\mathbf{r}) &= \sum_{\mathbf{q}_{\parallel}'} \left\{ \frac{2\pi e^2}{S \varepsilon_0 q_{\parallel}'} \int \left[e^{-i\mathbf{q}_{\parallel}' \cdot \boldsymbol{\rho}'} e^{-q_{\parallel}' |z-z'|} \psi_{\mathbf{k}_{\parallel}}^*(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}_{\parallel}+\mathbf{q}_{\parallel}}(\mathbf{r}') \right] d^2 \boldsymbol{\rho}' dz' \right\} e^{i\mathbf{q}_{\parallel}' \cdot \boldsymbol{\rho}} \\
&= \sum_{\mathbf{q}_{\parallel}'} \left\{ \frac{2\pi e^2}{S \varepsilon_0 q_{\parallel}'} \int \left[e^{-i\mathbf{q}_{\parallel}' \cdot \boldsymbol{\rho}'} e^{-q_{\parallel}' |z-z'|} \frac{e^{i\mathbf{q}_{\parallel}' \cdot \boldsymbol{\rho}'}}{S} \chi^2(z') \right] d^2 \boldsymbol{\rho}' dz' \right\} e^{i\mathbf{q}_{\parallel}' \cdot \boldsymbol{\rho}} \quad (3.73) \\
&= \frac{2\pi e^2}{S \varepsilon_0 q_{\parallel}'} e^{i\mathbf{q}_{\parallel}' \cdot \boldsymbol{\rho}} \int \left[e^{-q_{\parallel}' |z-z'|} \chi^2(z') \right] dz'.
\end{aligned}$$

Индукцированный потенциал будет равен

$$U_i(\mathbf{r}) = \frac{2}{S} \sum_{\mathbf{q}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}} \frac{M_{\mathbf{k}_{\parallel}+\mathbf{q}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}}^{(t)} (f_0(\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}) - f_0(\mathbf{k}_{\parallel}))}{\varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}+\mathbf{q}_{\parallel}} - \varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}}} \frac{2\pi e^2}{S \varepsilon_0 q_{\parallel}'} \int \left[e^{-q_{\parallel}' |z-z'|} \chi^2(z') \right] dz' e^{i\mathbf{q}_{\parallel}' \cdot \boldsymbol{\rho}}.$$

Входящий сюда матричный элемент $M_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}+\mathbf{q}_{\parallel}}^{(t)}$ оказывается не зависящим от \mathbf{k}_{\parallel} :

$$\begin{aligned}
M_{\mathbf{k}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}+\mathbf{q}_{\parallel}}^{(t)} &= M_t(\mathbf{q}_{\parallel}) = \int \psi_{\mathbf{k}_{\parallel}}^*(\mathbf{r}) U_t(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}_{\parallel}+\mathbf{q}_{\parallel}}(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} = \\
&= \frac{1}{S} \int \chi^2(z) \left[\int U_t(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{q}_{\parallel}' \cdot \boldsymbol{\rho}} d^2 \boldsymbol{\rho} \right] dz, \quad (3.74)
\end{aligned}$$

поэтому:

$$U_i(\mathbf{r}) = \frac{2}{S} \sum_{\mathbf{q}_{\parallel}} \frac{2\pi e^2 M_t(\mathbf{q}_{\parallel})}{S \varepsilon_0 q_{\parallel}'} \left(\int e^{-q_{\parallel}' |z-z'|} \chi^2(z') dz' \right) e^{i\mathbf{q}_{\parallel}' \cdot \boldsymbol{\rho}} \left[\sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} \frac{(f_0(\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}) - f_0(\mathbf{k}_{\parallel}))}{\varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}+\mathbf{q}_{\parallel}} - \varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}}} \right]. \quad (3.75)$$

Найдем теперь матричный элемент потенциала $U_i(\mathbf{r})$:

$$M_{\mathbf{k}_{\parallel}', \mathbf{k}_{\parallel}}^{(i)} = \int \psi_{\mathbf{k}_{\parallel}'}^*(\mathbf{r}) U_i(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}_{\parallel}}(\mathbf{r}) d^3 \mathbf{r} = \frac{1}{S} \int \chi^2(z) \left[\int U_i(\mathbf{r}) e^{-i(\mathbf{k}_{\parallel}' - \mathbf{k}_{\parallel}) \cdot \boldsymbol{\rho}} d^2 \boldsymbol{\rho} \right] dz.$$

Здесь интегрирование по \mathbf{p} , как видно из (3.75), даст дельта-функцию $\delta_{\mathbf{q}_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}'' - \mathbf{k}_{\parallel}'}$, после чего суммирование по \mathbf{q}_{\parallel} исчезнет. В результате, получим:

$$M_i(\mathbf{q}_{\parallel} = \mathbf{k}_{\parallel}'' - \mathbf{k}_{\parallel}') = M_{\mathbf{k}_{\parallel}', \mathbf{k}_{\parallel}''}^{(i)} = M_t(\mathbf{q}_{\parallel}) T(q_{\parallel}) A(\mathbf{q}_{\parallel}), \quad (3.76)$$

где величина

$$A(\mathbf{q}_{\parallel}) = \frac{2}{S} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} \frac{(f_0(\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}) - f_0(\mathbf{k}_{\parallel}))}{\varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}} - \varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}}} \quad (3.77)$$

определяется только энергетическим спектром и плотностью состояний в двумерной системе, а множитель

$$T(q_{\parallel}) = \frac{2\pi e^2}{\varepsilon_0 q_{\parallel}} \iint \left[e^{-q_{\parallel}|z-z'|} \chi^2(z) \chi^2(z') \right] dz' dz \quad (3.78)$$

зависит от конкретного вида волновых функций в квантовой яме.

Таким образом, (3.76) выражает матричный элемент индуцированного потенциала через матричный элемент полного потенциала. Используя (3.76) вместе с (3.64), получим:

$$M_t(\mathbf{q}_{\parallel}) = M_c(\mathbf{q}_{\parallel}) + M_i(\mathbf{q}_{\parallel}) = M_c(\mathbf{q}_{\parallel}) + M_t(\mathbf{q}_{\parallel}) T(\mathbf{q}_{\parallel}) A(\mathbf{q}_{\parallel}). \quad (3.79)$$

Отсюда нетрудно выразить матричный элемент экранированного потенциала:

$$M_t(\mathbf{q}_{\parallel}) = \frac{M_c(\mathbf{q}_{\parallel})}{1 - T(\mathbf{q}_{\parallel}) A(\mathbf{q}_{\parallel})} = \frac{M_c(\mathbf{q}_{\parallel})}{\varepsilon(\mathbf{q}_{\parallel})}. \quad (3.80)$$

Величина, стоящая в знаменателе (3.80), является диэлектрической проницаемостью электронного газа в квантовой яме,

$$\varepsilon(\mathbf{q}_{\parallel}) = 1 - T(\mathbf{q}_{\parallel}) A(\mathbf{q}_{\parallel}), \quad (3.81)$$

зависящей от волнового вектора электрона в плоскости ямы. Ее можно представить в виде

$$\varepsilon(\mathbf{q}_{\parallel}) = 1 - \frac{2\pi e^2}{\varepsilon_0 q_{\parallel}} g_s(\mathbf{q}_{\parallel}) A(\mathbf{q}_{\parallel}), \quad (3.82)$$

где форм-фактор

$$g_s(q_{\parallel}) = \iint \left[e^{-q_{\parallel} |z-z'|} \chi^2(z) \chi^2(z') \right] dz' dz \quad (3.83)$$

связан с конечной протяженностью волновой функции электрона вдоль оси z . В частном случае, когда электроны образуют строго двумерный электронный газ, и их волновую функцию можно представить в виде $\chi^2(z) = \delta(z)$, форм-фактор превращается в единицу.

Можно рассмотреть также два предельных случая, когда волновой вектор q_{\parallel} стремится к нулю или к бесконечности. В первом случае экспонента под интегралом в (3.83) превращается в единицу, и условия нормировки для $\chi(z)$ приводят к тому, что

$$\lim_{q_{\parallel} \rightarrow 0} g_s(\mathbf{q}_{\parallel}) = 1.$$

В противоположном случае экспонента убывает очень быстро,

$$\int e^{-q_{\parallel} |z-z'|} \chi^2(z') dz' \approx \chi^2(z') \frac{2}{q_{\parallel}},$$

и форм-фактор в пределе больших q_{\parallel} стремится к нулю:

$$\lim_{q_{\parallel} \rightarrow \infty} g_s(q_{\parallel}) = \lim_{q_{\parallel} \rightarrow \infty} \frac{2}{q_{\parallel}} \int \chi^4(z) dz = 0.$$

Поэтому, как предложил в 1981 г. Прайс, можно аппроксимировать эту зависимость формулой вида

$$g_s(\mathbf{q}_{\parallel}) = \frac{1}{1 + b q_{\parallel}}, \quad (3.84)$$

где параметр b подбирается для конкретного вида волновой функции $\chi(z)$. Например, для квантовой ямы с бесконечно высокими стенками даже простейший выбор $\pi b/a = 1$ дает ошибку не более 15% (рис. 3.7).

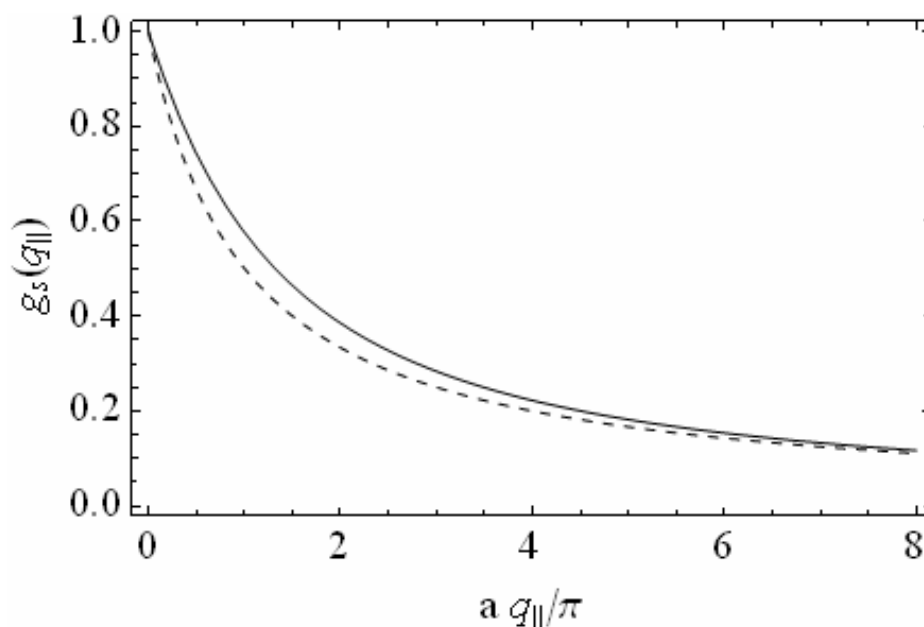


Рис. 3.7. Зависимость форм-фактора экранирования $g_s(\mathbf{q}_{\parallel})$ от волнового вектора q_{\parallel} для квантовой ямы с бесконечно высокими стенками.

Сплошная линия – точный расчет по формуле (3.83),
пунктир – приближение (3.84) с $\pi b/a = 1$

Заметим, что расчет для объемного образца дает выражения, аналогичные (3.80) – (3.81), в которых q_{\parallel} необходимо заменить на q , а матричные элементы берутся по функциям (3.61). При этом форм-фактор исчезает, и диэлектрическая проницаемость оказывается равной

$$\varepsilon(\mathbf{q}) = 1 - \frac{4\pi e^2}{\varepsilon_0 q^2} A(\mathbf{q}). \quad (3.85)$$

Выражение для $A(\mathbf{q})$ в объемном образце дается формулой (3.77) с точностью до замены q_{\parallel} на q . Если электронный газ в квантовой яме является строго двумерным, то форм-фактор $g_s(\mathbf{q}_{\parallel})$ обращается в единицу, и соотношение между диэлектрическими проницаемостями (3.82) и (3.85) оказывается наиболее простым. Необходимо просто заменить трехмерный фурье-образ кулоновского потенциала $4\pi e^2 / \varepsilon_0 q^2$ его двумерным аналогом $2\pi e^2 / \varepsilon_0 q_{\parallel}$.

При слабом пространственном изменении поля примеси можно воспользоваться пределом малых волновых векторов $|q_{\parallel}|$, который позволяет заменить дробь под знаком суммы в (3.77) на производную от функции распределения $(-\partial f_0(\varepsilon - \mu) / \partial \varepsilon)$. В этом случае

$$A(\mathbf{q}_{\parallel}) \approx -2 \int \left(-\frac{\partial f_0(\varepsilon - \mu)}{\partial \varepsilon} \right) g_{2D}(\varepsilon) d\varepsilon = -\frac{m}{\pi \hbar^2} f_0(-\mu), \quad (3.86)$$

и диэлектрическую проницаемость можно записать в виде

$$\varepsilon(\mathbf{q}_{\parallel}) = 1 + (r_0^{2D} q_{\parallel})^{-1}, \quad (3.87)$$

где радиус экранирования для двумерного случая равен

$$\left(r_0^{2D}\right)^{-1} = -\frac{2\pi e^2}{\varepsilon_0} A(\mathbf{q}_{\parallel}) = \frac{2me^2}{\varepsilon_0 \hbar^2} f_0(-\mu). \quad (3.88)$$

Для сравнения, в объемном образце в длинноволновом пределе

$$\varepsilon(\mathbf{q}) = 1 + (r_0 q)^{-2}, \quad (3.89)$$

а радиус экранирования дается выражением (3.60).

Сравнение (3.87) и (3.89) показывает, что размерное квантование изменяет зависимость диэлектрической проницаемости электронного газа от волнового вектора q . Это приводит к тому, что в двумерном случае экранирование становится более слабым. Если в объемном образце экранированный потенциал убывал с расстоянием экспоненциально, то в двумерном случае экранирование оказывается степенным. В частности, в пределе чисто двумерного электронного газа потенциальная энергия кулоновского заряда убывает с расстоянием как $1/r^3$ [10]. Качественно это отличие объясняется тем, что электроны локализованы в квантовой яме и, поэтому, ограничены в своем движении. Это затрудняет перераспределение заряда и уменьшает эффект экранирования по сравнению с объемным случаем.

Другим следствием влияния размерного квантования на экранирование является изменение концентрационной зависимости радиуса экранирования (см. рис. 3.8).

Из рис. 3.8 видно, что с ростом химпотенциала и концентрации электронов при малых μ^* радиусы экранирования сначала уменьшаются, что соответствует усилению экранирования. Однако затем при больших концентрациях радиус экранирования в объемном образце продолжает убывать, а в образце с квантовыми ямами выходит на насыщение и перестает зависеть от химпотенциала. Это связано с различной энергетической зависимостью плотности состояний $g_{3D}(\varepsilon)$ и $g_{2D}(\varepsilon)$. В пределе сильного вырождения, когда

производная от функции распределения $(-\partial f_0(\varepsilon - \mu)/\partial \varepsilon)$ стремится к дельта-функции $\delta(\varepsilon - \mu)$, это легко увидеть, рассмотрев интеграл в выражении (3.86), который оказывается равным $g_{2D}(\mu)$ и не зависит от энергии. В объемном образце выражение для $A(\mathbf{q})$ содержит интеграл того же вида, поэтому $A(\mathbf{q}) \sim g_{3D}(\mu) \sim \sqrt{\mu}$, и радиус экранирования, обратно пропорциональный $\sqrt{A(\mathbf{q})}$, будет убывать с ростом химпотенциала: $(r_0^{(3D)})^{-2} \sim \sqrt{\mu}$.

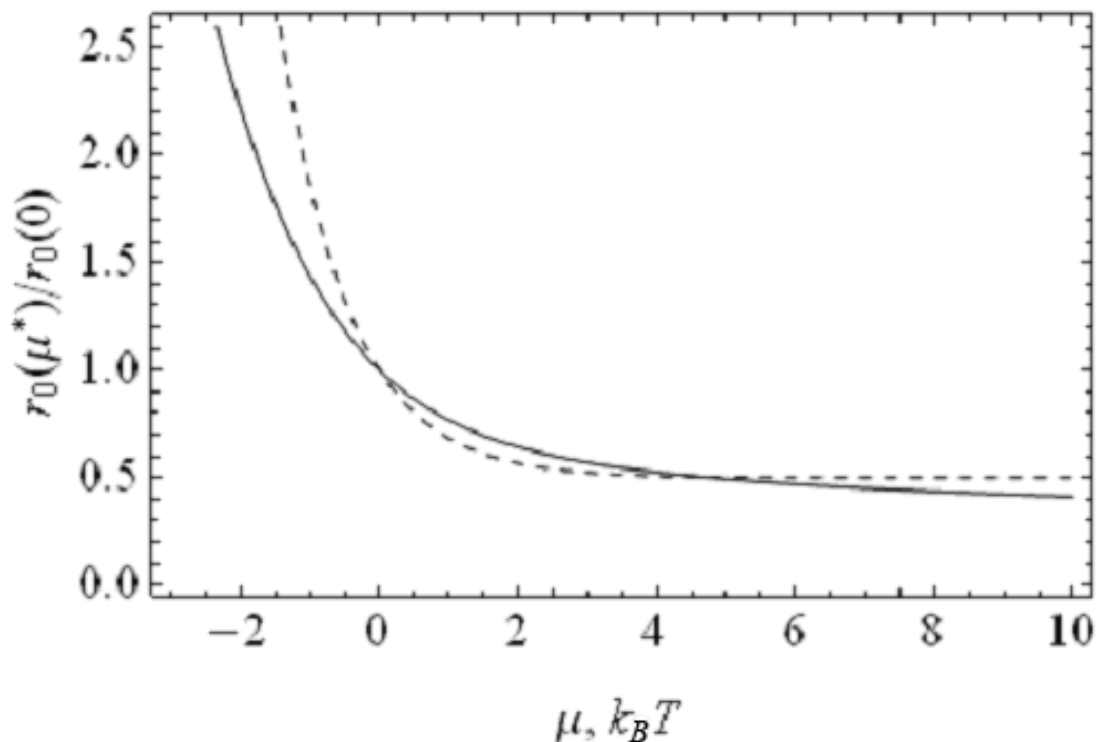


Рис. 3.8. Зависимость радиуса экранирования от химпотенциала $\mu^* = \mu/k_B T$. Сплошная линия – для объемного образца, пунктир – для двумерной системы

Вернемся теперь к расчету подвижности при рассеянии на кулоновском потенциале. Рассмотрим примесный центр, расположенный в точке с координатами $\mathbf{r}_0 = (\boldsymbol{\rho}_0 = 0, z_0)$. Используя (3.72), можно записать разложение потенциала примеси в двумерный ряд Фурье:

$$U_c(\mathbf{r}) = \frac{e^2}{\varepsilon_0 \sqrt{\rho^2 + (z - z_0)^2}} = \sum_{\mathbf{q}_{\parallel}} \left\{ \frac{2\pi e^2}{S \varepsilon_0 q_{\parallel}} e^{-q_{\parallel} |z - z_0|} \right\} e^{i\mathbf{q}_{\parallel} \cdot \boldsymbol{\rho}}. \quad (3.90)$$

Если квантовая яма ограничена плоскостями $z = 0$ и $z = a$, то матричный элемент кулоновского потенциала примеси может быть записан аналогично (3.73):

$$\begin{aligned} M_c(\mathbf{q}_{\parallel}, z_0) &= \int \left[\psi_{\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}}^*(\mathbf{r}) U_c(\mathbf{r}) \psi_{\mathbf{k}_{\parallel}}(\mathbf{r}) \right] d^2\rho dz = \\ &= \sum_{\mathbf{q}_{\parallel}} \left\{ \frac{2\pi e^2}{S \varepsilon_0 q_{\parallel}} \int \left[e^{-q_{\parallel} |z - z_0|} \frac{e^{i\mathbf{q}_{\parallel} \cdot \boldsymbol{\rho}} e^{-i\mathbf{q}_{\parallel} \cdot \boldsymbol{\rho}}}{S} \chi^2(z) \right] d^2\rho dz \right\} = \\ &= \frac{2\pi e^2}{S \varepsilon_0 q_{\parallel}} \int e^{-q_{\parallel} |z - z_0|} \chi^2(z) dz = \frac{2\pi e^2}{S \varepsilon_0 q_{\parallel}} g_i(q_{\parallel}, z_0), \end{aligned} \quad (3.91)$$

где $g_i(q_{\parallel}, z_0)$ – форм-фактор экранирования. Используя (3.80), (3.82) и (3.91), для матричного элемента экранированного потенциала можно записать:

$$M_t(\mathbf{q}_{\parallel}, z_0) = \frac{2\pi e^2}{S \varepsilon_0 q_{\parallel}} \frac{g_i(q_{\parallel}, z_0)}{1 - \frac{2\pi e^2}{\varepsilon_0 q_{\parallel}} g_s(\mathbf{q}_{\parallel}) A(\mathbf{q}_{\parallel})}. \quad (3.92)$$

Если примесь расположена достаточно далеко от квантовой ямы, то

$$g_i(q_{\parallel}, z_0) \approx e^{-q_{\parallel} |z_0|}. \quad (3.93)$$

Отсюда видно, что, несмотря на более слабое экранирование, вероятность рассеяния, пропорциональная квадрату модуля матричного элемента, может быть значительно снижена, если примесные атомы поместить на некотором расстоянии z_0 от квантовой ямы (модулированное легирование).

Если концентрация примесных атомов не слишком велика, то можно считать, что примесные центры воздействуют на электроны в квантовой яме независимо друг от друга, и поэтому вероятность рассеяния электрона дается суммой по примесным центрам:

$$W(\mathbf{q}_{\parallel}) = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{z_0} |M_t(\mathbf{q}_{\parallel}, z_0)|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}). \quad (3.94)$$

Для упрощения расчета рассмотрим случай, когда все примесные атомы сосредоточены в узком слое, находящемся на расстоянии z_0 от квантовой ямы. Тогда суммирование можно свести к умножению на количество примесных атомов:

$$W(\mathbf{q}_{\parallel}) = \frac{2\pi}{\hbar} N_i |M_t(\mathbf{q}_{\parallel}, z_0)|^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}} - \varepsilon_{\mathbf{k}'}). \quad (3.95)$$

Используем теперь выражение (3.7) для вычисления времени релаксации:

$$\tau^{-1}(k_{\parallel}) = \frac{2\pi}{\hbar} N_i \int |M_t(\mathbf{q}_{\parallel}, z_0)|^2 \left(\frac{-\mathbf{k}_{\parallel} \mathbf{q}_{\parallel}}{k_{\parallel}^2} \right) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}} - \varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}}) \frac{S d^2 q_{\parallel}}{(2\pi)^2}. \quad (3.96)$$

В данном случае матричный элемент зависит только от модуля волнового вектора q_{\parallel} . Поэтому можно перейти к интегрированию в полярной системе координат и провести интегрирование по углу, преобразовав δ -функцию к виду

$$\delta(\varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel}} - \varepsilon_{\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}_{\parallel}}) = \frac{m}{\hbar^2 k_{\parallel} q_{\parallel}} \delta\left(\cos\theta + \frac{q_{\parallel}}{2k_{\parallel}}\right) \quad (3.97)$$

и применив формулу

$$\int_0^{2\pi} \cos\theta \delta\left(\frac{q_{\parallel}}{2k_{\parallel}} + \cos\theta\right) d\theta = -\frac{q_{\parallel}}{2k_{\parallel}} \frac{2}{\sqrt{1 - (q_{\parallel}/2k_{\parallel})^2}}. \quad (3.98)$$

В результате, для времени релаксации получится следующее выражение

$$\tau^{-1}(k_{\parallel}) = \frac{2\pi}{\hbar} N_i S \frac{2m}{\pi^2 \hbar^2} \int_0^{2k_{\parallel}} |M_t(q_{\parallel}, z_0)|^2 \frac{(q_{\parallel}/2k_{\parallel})^2}{\sqrt{1 - (q_{\parallel}/2k_{\parallel})^2}} \frac{dq_{\parallel}}{2k_{\parallel}}. \quad (3.99)$$

Используя явное выражение для матричного элемента рассеяния (3.92), имеем:

$$\tau^{-1}(k_{\parallel}) = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{N_i}{S} \frac{2m}{\hbar^2 k_{\parallel}^2} \frac{e^4}{\varepsilon_0^2} \times \\ \times \int_0^{2k_{\parallel}} \frac{g_i^2(q_{\parallel}, z_0)}{\left(\frac{q_{\parallel}}{2k_{\parallel}} - \frac{2\pi e^2}{(2k_{\parallel})\varepsilon_0} g_s(\mathbf{q}_{\parallel}) A(\mathbf{q}_{\parallel})\right)^2} \frac{(q_{\parallel}/2k_{\parallel})^2}{\sqrt{1 - (q_{\parallel}/2k_{\parallel})^2}} \frac{dq_{\parallel}}{2k_{\parallel}}. \quad (3.100)$$

Для упрощения дальнейших расчетов рассмотрим строго двумерный электронный газ, когда $g_s(q_{\parallel}) = 1$, $g_i(q_{\parallel}, z_0) = \exp(-q_{\parallel} |z_0|)$, берется предел малых волновых векторов

q_{\parallel} . Используя выражение для радиуса экранирования (3.88), можно записать время релаксации для этого случая в виде

$$\tau^{-1}(k_{\parallel}) = \frac{2\pi}{\hbar} N_{is} \frac{2m}{\hbar^2 k_{\parallel}^2} \frac{e^4}{\varepsilon_0^2} F_i^{2D}(k_{\parallel}), \quad (3.101)$$

где $N_{is} = N_i / S$ – число примесных центров на единицу площади, а для интеграла по q_{\parallel} введено обозначение

$$F_i^{2D}(k_{\parallel}) = \int_0^1 \frac{e^{-4k_{\parallel} |\xi| z_0} \xi^2 d\xi}{\left(\xi + (2k_{\parallel} r_0^{2D})^{-1} \right)^2 \sqrt{1 - \xi^2}}, \quad (3.102)$$

в котором $\xi = q_{\parallel} / 2k_{\parallel}$.

Теперь нетрудно записать выражение для подвижности строго двумерного электронного газа, ограниченной рассеянием на удаленных примесях

$$\mu_i^{2D} = \frac{e}{m} \langle \tau \rangle = \frac{e \hbar k_B T \varepsilon_0^2}{m 2\pi N_{is} e^4} \frac{\int_0^{\infty} \left(-\frac{\partial f_0(x)}{\partial x} \right) \frac{x^2}{F_i^{2D}(k_{\parallel})} dx}{\int_0^{\infty} \left(-\frac{\partial f_0(x)}{\partial x} \right) x dx}. \quad (3.103)$$

Аналогичная формула для объемного образца, в соответствии с (3.63), (3.21), имеет вид

$$\mu_i^{3D} = \frac{e}{m} \frac{\sqrt{2m} (k_B T)^{3/2}}{\pi N_i} \frac{\varepsilon_0^2}{e^4} \frac{\int_0^{\infty} \left(-\frac{\partial f_0(x)}{\partial x} \right) \frac{x^3}{F_i(k)} dx}{\int_0^{\infty} \left(-\frac{\partial f_0(x)}{\partial x} \right) x^{3/2} dx}. \quad (3.104)$$

Примесное рассеяние преобладает при низких температурах, когда электронный газ становится вырожденным. Поэтому при вычислении подвижности можно взять время релаксации при $k_{\parallel} = k_F$. В системах с высокой подвижностью стараются выбирать $|z_0| \gg r_0^{2D}$, тогда за счет быстро убывающего экспоненциального множителя основной вклад в интеграл (3.102) дадут $q_{\parallel} \leq |z_0|^{-1} \ll (r_0^{2D})^{-1}$, поэтому приближенно его можно вычислить как

$$F_i^{2D}(k_F) \approx \left(2k_F r_0^{2D}\right)^2 \int_0^{\infty} e^{-4k_F |z_0| \xi} \xi^2 d\xi = \frac{(k_F r_0^{2D})^2}{8(k_F |z_0|)^3}. \quad (3.105)$$

Тогда время релаксации (3.101) можно записать в виде

$$\tau^{-1}(k_F) = \frac{2\pi}{\hbar} N_{is} \frac{2m}{\hbar^2} \frac{e^4}{\varepsilon_0^2} \frac{(r_0^{2D})^2}{8(k_F |z_0|)^3}, \quad (3.106)$$

откуда, учитывая, что в вырожденном случае $r_0^{2D} \approx (\hbar^2 / 2m) (\varepsilon_0 / e^2)$, получим:

$$\tau^{-1}(k_F) = \frac{2\pi}{\hbar} N_{is} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{8(k_F |z_0|)^3}, \quad (3.107)$$

а подвижность тогда оказывается равной

$$\mu_i^{2D} = \frac{8e(k_F |z_0|)^3}{\pi \hbar N_{is}}. \quad (3.108)$$

Из (3.108) видно, что подвижность возрастает с увеличением расстояния до слоя, содержащего ионизованные примеси, как $|z_0|^3$. В двумерном электронном газе подвижность возрастает с концентрацией носителей пропорционально $k_F^3 \sim n_{2D}^{3/2}$, а также уменьшается обратно пропорционально концентрации рассеивающих примесей.

Оценим возможные значения подвижностей при рассеянии на удаленных примесях.

Например, при температуре жидкого гелия, то есть при $T = 4,2$ К, а также при эффективной массе электрона $m = 0,2m_0$ и двумерной концентрации электронов $n_{2D} = 5,0 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$, химпотенциал равен $\mu = 16,5 k_B T$. Если диэлектрическая проницаемость $\epsilon_0 = 12$, то радиус экранирования $r_0^{2D} \approx 1,6 \text{ нм}$. Если концентрация примеси равна концентрации носителей и $z_0 = 15 \text{ нм}$, то подвижность, рассчитанная по приближенной формуле (3.108), равна $1,5 \cdot 10^5 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$. Точное вычисление по формулам (3.102), (3.103) дает $1,9 \cdot 10^5 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$, что близко к значениям, полученным на опыте для гетероструктур $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x/\text{Si}$.

Еще более высокие значения подвижностей – порядка $2 \cdot 10^6 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$ при гелиевых температурах – были достигнуты в гетероструктурах на основе GaAs, в которых слой, содержащий примесные атомы, был отделен нелегированным спейсерным слоем AlGaAs толщиной 20 нм. С увеличением температуры выше нескольких десятков градусов Кельвина увеличивается интенсивность рассеяния на акустических, а затем и на оптических фононах, и подвижность носителей начинает уменьшаться.

3.5. КВАНТОВЫЙ ЭФФЕКТ ХОЛЛА

3.5.1. Наблюдение квантового эффекта Холла

В 1980 году физик Клаус фон Клитцинг (Штутгарт, Германия) в результате исследований электрического сопротивления двумерного электронного газа в инверсионном слое кремниевой МОП-структуры открыл необычное явление, получившее название *целочисленного квантового эффекта Холла* – ЦКЭХ. Этот эффект проявляется в том, что холловское сопротивление R_H двумерного электронного газа в полупроводнике при низких температурах ($T \sim 1,5$ К) в сильном магнитном поле ($B \sim 15$ Тл) принимает строго квантованные значения:

$$R_H = \frac{1}{i} \frac{2\pi\hbar}{e^2} \approx \frac{1}{i} 25812,80 \text{ Ом}, \quad i = 1, 2, 3, \dots \quad (3.109)$$

Величина $R_K = 2\pi\hbar/e^2$ называется постоянной фон Клитцинга.

Впоследствии квантование холловского сопротивления было обнаружено не только в структурах МДП («металл–диэлектрик–полупроводник» или МОП, то есть «металл–окисел–полупроводник»), но и в других системах, содержащих двумерный электронный газ с вырожденной статистикой, например, в квантовых ямах на основе полупроводниковых гетероструктур GaAs–Al_xGa_{1-x}As.

Важными условиями для наблюдения КЭХ наряду с двумерностью системы носителей заряда, обусловленной размерным квантованием, являются: совершенство образцов (высокая подвижность носителей заряда), сильное (квантующее) магнитное поле \mathbf{B} , приложенное перпендикулярно слою с носителями заряда, и низкая температура T . Эти условия можно выразить неравенствами:

$$\omega_c \tau \gg 1, \quad \hbar\omega_c \gg k_B T, \quad (3.110)$$

где $\omega_c = eB/mc$ – циклотронная частота для электронов с эффективной массой m , τ – время релаксации. В следующих разделах мы обсудим картину движения электронов в квантующем магнитном поле подробно, а пока укажем лишь, что в силу условий (3.110) подзоны размерного квантования превращаются в многократно вырожденные энергетические уровни (уровни Ландау). Каждой из двух возможных ориентаций электронного спина отвечает своя серия уровней Ландау, располагающихся на шкале энергии с шагом $\hbar\omega_c$. Хаотический потенциал дефектов кристаллической структуры приводит к существенному размытию этих уровней. В зависимости от величины магнитного поля и концентрации электронов вырожденный электронный газ заполняет один или несколько низших уровней Ландау. Целое число i в формуле (3.109) интерпретируется как число заполненных уровней.

В 1982 году физики-экспериментаторы Тсуи, Штёрмер и Госсард обнаружили *дробный квантовый эффект Холла* – ДКЭХ. Внешне отличие дробного КЭХ от целочисленного сводится к замене целого числа i в формуле (3.109) дробью p/q с целыми числами p и q :

$$R_H = \frac{q}{p} \frac{2\pi\hbar}{e^2}. \quad (3.111)$$

Однако, как впоследствии было показано Р. Б. Лафлином и рядом других физиков-теоретиков, ЦКЭХ и ДКЭХ существенно различаются своей физической природой. Целочисленный квантовый эффект Холла можно объяснить в рамках одноэлектронного приближения (в модели невзаимодействующих электронов), если учесть *хаотический потенциал*, создаваемый примесями и прочими дефектами кристаллической структуры в реальных образцах. Хаотический потенциал размывает уровни Ландау и приводит к появлению локализованных электронных состояний. Для объяснения дробного КЭХ существенную роль играет ещё и кулоновское

электрон-электронное взаимодействие. Это взаимодействие придаёт системе двумерных электронов, помещённой в сильное магнитное поле, свойства квантовой жидкости, возбуждённые состояния которой подобны квазичастицам с дробным электрическим зарядом. Таким образом, ДКЭХ имеет ещё более сложную природу, чем ЦКЭХ, а для его наблюдения необходимы более жёсткие условия (более высокая подвижность носителей, температура ниже 1 К), при которых становится заметной указанная роль взаимодействия между электронами.

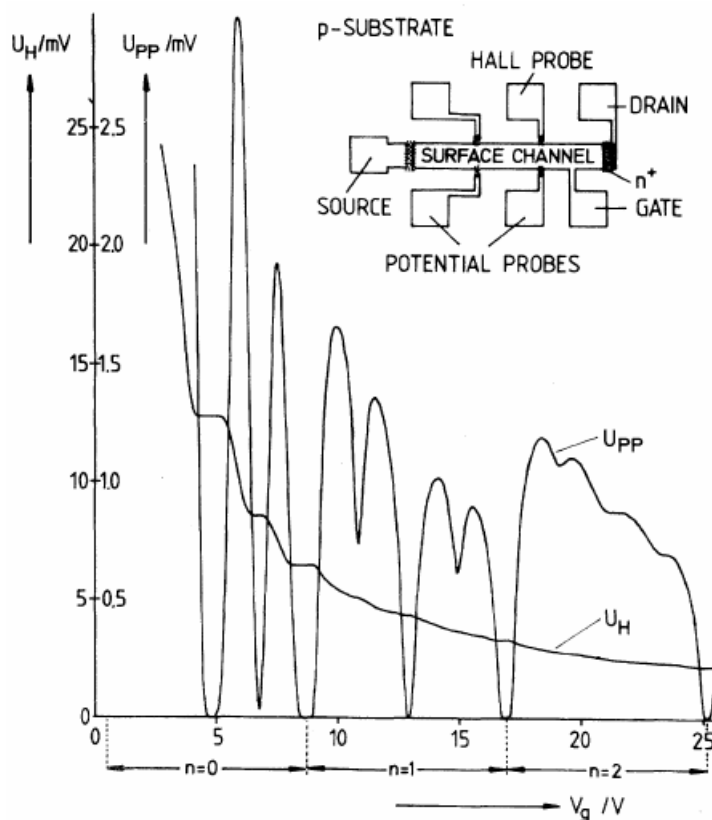


Рис. 3.9. Открытие ЦКЭХ. Данные из работы *K.v.Klitzing, G.Dorda, M.Pepper* / Phys. Rev. Lett. – 1980. – Vol. 45. – P. 494–497.

Показаны зависимости холловского напряжения (U_H) и продольного напряжения между потенциальными контактами (U_{pp}) от напряжения (V_g) на затворе МОП-транзистора. $T = 1,5$ К, $B = 18$ Тл, продольный электрический ток между контактами «source–drain» (исток–сток) $I = 1$ мкА. На вставке изображена структура МОП-транзистора, вид сверху. Длина образца $L = 400$ мкм, ширина $W = 50$ мкм, расстояние между потенциальными контактами $L_{pp} = 130$ мкм

Для того чтобы отчётливее понять специфику эффекта квантования холловского сопротивления, обратимся к экспериментальным данным (см. рис. 3.9 – 3.11).

В показанной на рис. 3.9 МОП-структуре двумерный электронный газ образуется в инверсионном n -слое в кремниевой подложке p -типа у поверхности, перпендикулярной направлению (001). При низкой температуре и относительно малой концентрации электроны заселяют только самые нижние (на шкале энергии) состояния – в двух одинаковых подзонах размерного квантования, которые соответствуют двум долинам зоны проводимости кремния на оси k_z , параллельной направлению (001). В этом случае остальные четыре долины, расположенные на осях k_x и k_y , не заселены, и их можно не принимать во внимание. В отсутствие магнитного поля каждая из подзон двукратно вырождена по спину, то есть с учётом спина речь идёт о четырёх одинаковых подзонах, заселяемых электронами. В магнитном поле четыре подзоны превращаются в четыре серии уровней Ландау. На рис. 3.9 номера уровней Ландау указаны под осью абсцисс: $n = 0, 1, 2$. Спиновое вырождение магнитным полем снимается. Если по каким-либо причинам в образце снято и двукратное долинное вырождение, то каждому номеру n отвечают четыре уровня Ландау, смещённые друг относительно друга.

С ростом напряжения на затворе V_g концентрация электронов в инверсионном слое увеличивается, и уровни Ландау последовательно заполняются. Из классических представлений о природе эффекта Холла (ниже мы их рассмотрим подробно) следует, что холловское сопротивление R_H , а значит и холловское напряжение $U_H = R_H I$ с ростом V_g должны монотонно убывать – обратно пропорционально концентрации электронов. На рис. 3.9 подобное убывание хорошо прослеживается, но при этом присутствуют ещё и ступеньки с протяжёнными *плато* (горизонтальные участки ступенек). Отчётливо видно, что на первых трёх плато, слева направо, холловское

напряжение соответствует формуле (3.109) для квантованных значений сопротивления с $i = 2, 3, 4$. При тех же значениях V_g , где наблюдаются плато, продольное напряжение имеет резкие минимумы, то есть резко уменьшается продольное сопротивление.

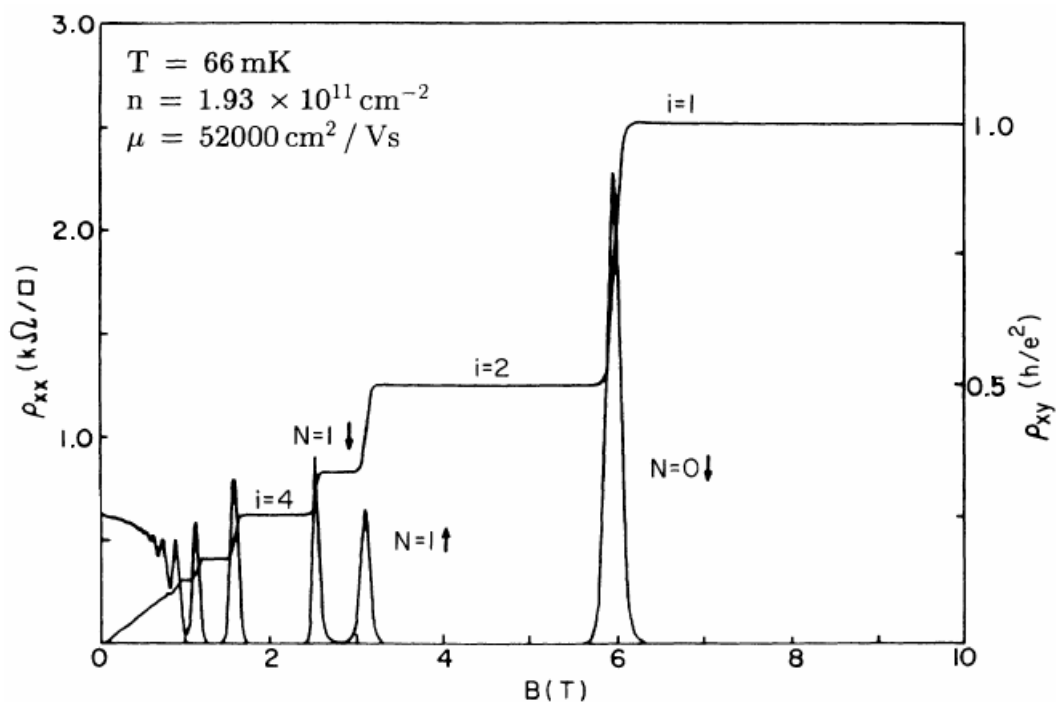


Рис. 3.10. Целочисленный квантовый эффект Холла в гетероструктуре GaAs–Al_xGa_{1-x}As. Данные из работы *H.P.Wei, S.Y.Lin, D.C.Tsui, A.M.M.Pruisken / Phys. Rev. B. – 1992. – Vol. 47. – P. 3926–3928*

Указанные проявления ЦКЭХ ещё более ясно видны на рис. 3.10, где приведены результаты измерений продольного удельного ρ_{xx} и поперечного (холловского) сопротивления ρ_{xy} для двумерного электронного газа в зоне проводимости слоя GaAs. Здесь слой GaAs служит квантовой ямой с одной подзоной размерного квантования. В магнитном поле образуются две серии уровней Ландау ($N \uparrow$ и $N \downarrow$, где $N = 0, 1, 2, \dots$ – номер уровня Ландау, \uparrow, \downarrow – ориентация спина электронов). Концентрация электронов в квантовой яме определяется количеством примесей в барьерах; в данном примере концентрация электронов постоянна. С ростом магнитного

поля (B) расстояние между уровнями увеличивается, поскольку пропорционально B увеличивается как циклотронная частота, так и величина спинового расщепления уровней Ландау. Наряду с этим увеличивается количество состояний на каждом уровне. В результате, с ростом B число полностью заселённых уровней Ландау i уменьшается. Как показано на рис. 3.10, при наибольшем достигнутом значении магнитного поля заселяются состояния только одного уровня Ландау ($i = 1$), самого низшего.

Рассмотренная картина демонстрирует следующие особенности ЦКЭХ, которые требуют детального объяснения. Мы видим, что, несмотря на непрерывный характер изменения параметров (таких как V_g или B), холловское сопротивление принимает дискретные значения (3.109) не в отдельных точках, а на протяжённых отрезках – плато. Прецизионные измерения показывают, что точность, с которой в области плато выдерживается равенство (3.109), очень высока: относительное отклонение измеренных значений R_H от $h / (ie^2)$ имеет порядок 10^{-8} . Продольное сопротивление в области плато с понижением температуры становится очень малым; оно заметно отличается от нуля только в промежутках между соседними плато (а также в слабом магнитном поле, где проявления КЭХ исчезают).

На рис. 3.11 представлены данные, на основе которых был открыт дробный квантовый эффект Холла (ДКЭХ). Эти данные относятся к двумерной системе электронов в квантовой яме, причём подвижность электронов здесь существенно более высокая, чем в образцах, демонстрирующих только ЦКЭХ. Видно, что с уменьшением температуры ниже 1 К на зависимости холловского сопротивления от магнитного поля $\rho_{xy}(B)$ формируется новое плато, отвечающее дробному значению фактора заполнения уровня Ландау: $\nu = 1/3$. При этом «обычные» плато ЦКЭХ, отвечающие целым значениям $\nu = i$, также присутствуют на графиках $\rho_{xy}(B)$, но с понижением температуры их форма (протяжённость) изменяется не

очень сильно. Новое плато ($\nu = 1/3$) располагается в области высоких значений магнитного поля, при которых все электроны заселяют состояния единственного уровня Ландау, заполняя этот уровень лишь частично.

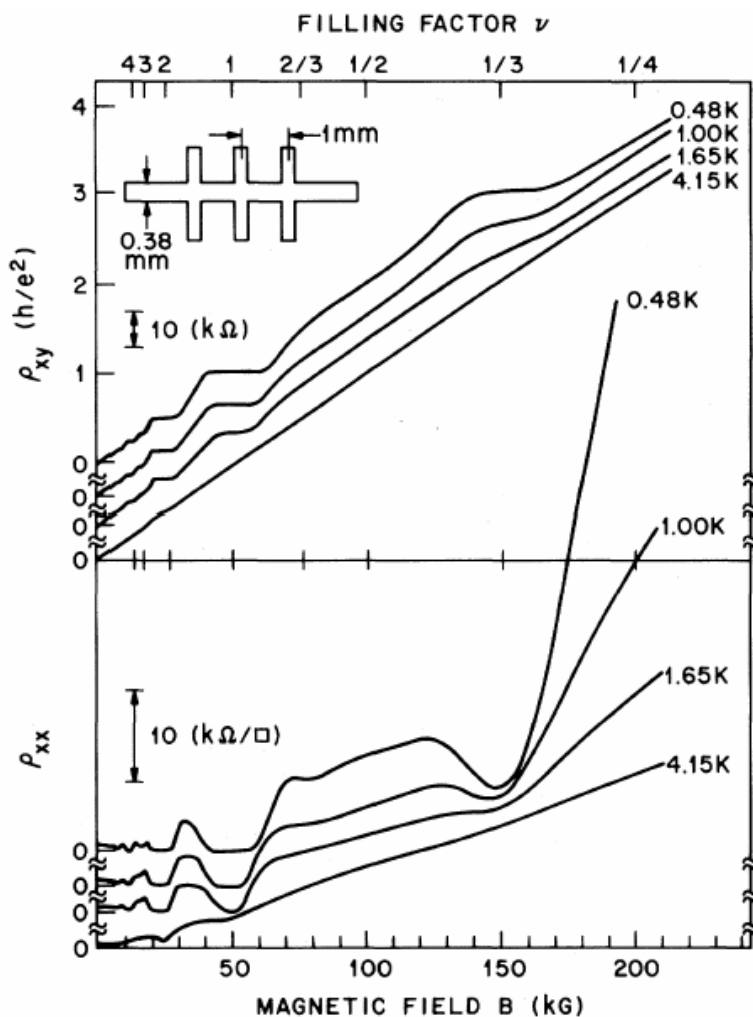


Рис. 3.11. Дробный квантовый эффект Холла в гетероструктуре GaAs– $Al_{0,3}Ga_{0,7}As$. Данные из работы *D.C.Tsui, H.L.Stormer, A.C.Gossard / Phys. Rev. Lett. – 1982. – Vol. 48. – P. 1559–1562.*

Двумерная концентрация электронов в квантовой яме $n = 1,23 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$,
подвижность $\mu = 90000 \text{ см}^2/\text{В} \cdot \text{с}$

Продольное сопротивление в области плато с $\nu = 1/3$ имеет минимум. При более высоких значениях магнитного поля ($\nu < 1/3$) продольное сопротивление экспоненциально растёт с ростом $1/T$.

3.5.2. Удельное сопротивление в системах различной размерности

Дальнейшее обсуждение мы разобьём на ряд небольших вопросов, которые в совокупности освещают простые, но важные детали поведения электронов в магнитном поле. Обычно в учебных пособиях малого формата даются лишь ссылки на разбор таких вопросов в соответствующих разделах учебников. Для удобства читателя здесь мы собрали всё вместе: будут рассмотрены особенности измерения эффекта Холла в системах различной размерности, классическая и квантовая задачи о движении электрона в скрещенных магнитном и электрическом полях, а в завершение – отдельные качественные аспекты теории ЦКЭХ.

Начнём с довольно очевидных замечаний о физической размерности удельного электрического сопротивления и самого сопротивления.

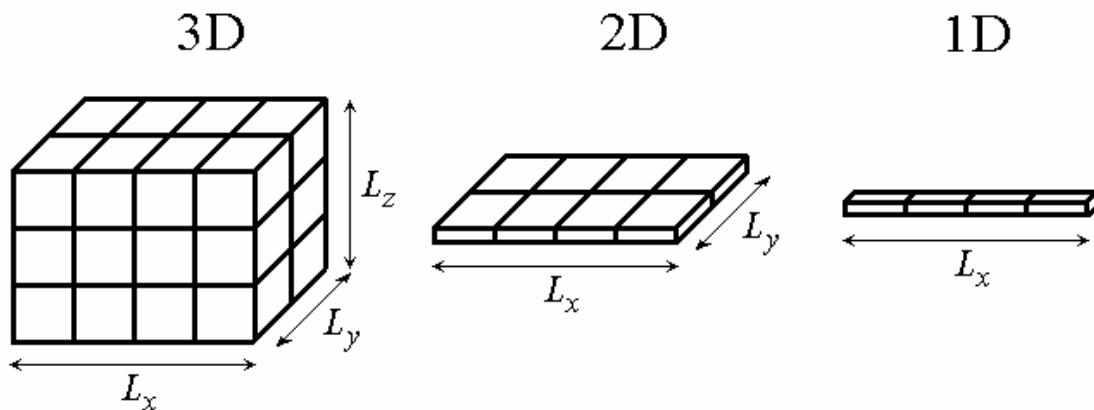


Рис. 3.12. К определению размерности удельного сопротивления. Трёхмерный (3D), двумерный (2D) и одномерный (1D) образцы рассматриваются как электрическое соединение однотипных элементов. 1D-образец имеет вид цепочки последовательно соединённых одномерных элементов единичной длины. 2D-образец можно представить как цепочки квадратных элементов единичной площади, ориентированные, скажем, вдоль x ; вдоль y такие цепочки соединены параллельно. Аналогично, 3D-образец представляется вытянутыми вдоль x цепочками единичных кубов; такие цепочки соединены параллельно вдоль y и вдоль z

Рассмотрим трёхмерный образец проводника, имеющий форму прямоугольного параллелепипеда. Как показано на рис. 3.12, такой образец можно представить себе в виде системы кубов единичного объёма, которые последовательно соединены в одинаковые цепочки, ориентированные вдоль x . Примем временно, что ρ – электрическое сопротивление одного куба, L_x – безразмерное число кубов в одной цепочке. Аналогично, L_y и L_z – число кубов, расположенных вдоль y и z , так что $L_y L_z$ – количество параллельно соединённых одинаковых цепочек. Тогда сопротивление образца R в направлении x есть

$$R = \rho \frac{L_x}{L_y L_z} \quad (3D). \quad (3.112)$$

Преобразуем правую часть этого равенства, умножив каждое из чисел L_x, L_y, L_z на единицу длины и умножив ρ на соответствующую степень единицы длины, чтобы равенство осталось верным. Теперь можно считать, что в этом равенстве величины L_x, L_y, L_z – размеры образца, измеряемые в единицах длины, а ρ – удельное сопротивление с размерностью сопротивления, умноженного на соответствующую степень единицы длины: $[\rho] = [R] [L]$. Например, если за единицу сопротивления выбрать Ом, а за единицу длины – сантиметр, то для удельного сопротивления ρ трёхмерного проводника единицей измерения будет Ом·см.

Подобным же образом из рис. 3.12 видна связь между сопротивлением R (в направлении x) и удельным сопротивлением ρ для двумерного проводника с размерами L_x, L_y :

$$R = \rho \frac{L_x}{L_y} \quad (2D). \quad (3.113)$$

Для сопротивления одномерного проводника мы получим:

$$R = \rho L_x \quad (1D). \quad (3.114)$$

Таким образом, формула, связывающая физические размерности сопротивления, удельного сопротивления и длины, в общем случае имеет следующий вид:

$$[\rho] = [R][L]^{d-2}, \quad (3.115)$$

где d – пространственная размерность системы. Двумерный случай выделяется тем, что в этом случае удельное сопротивление и сопротивление имеют одинаковую размерность: $[\rho] = [R]$ при $d = 2$.

Размерность сопротивления $[R]$ мы определим из закона Ома – как размерность отношения разности потенциалов V на образце к электрическому току I , протекающему через образец. В принципе, для измерения сопротивления одномерных, двумерных и трехмерных образцов можно использовать одну и ту же схему с вольтметром и амперметром, так что размерность сопротивления будет одной и той для всех d . Вспомнив, что $[V] = [q] / [L]$ и $[I] = [q] / [T]$, где q – электрический заряд, T – время, находим, что сопротивление имеет размерность, обратную размерности скорости:

$$[R] = \frac{[V]}{[I]} = \frac{[q]/[L]}{[q]/[T]} = \frac{[T]}{[L]}. \quad (3.116)$$

Теперь обратим внимание на то, что в законах физики присутствуют универсальные постоянные с размерностью скорости. Самая известная из них – это скорость света: $c \approx 2,997924 \cdot 10^{10}$ см / с. Согласно (3.116), величине $1/c$ отвечает некоторое значение электрического сопротивления; полезно его выразить в омах. Соотношение между единицами 1 Ом и 1 с / см можно выяснить по

справочникам, но его нетрудно установить и самостоятельно, если знать, например, величину заряда электрона в системах СИ и СГС:

$$e \approx 1,602176 \cdot 10^{-19} \text{ Кл} \approx 4,803204 \cdot 10^{-10} \text{ ед. зар. СГС.}$$

Действительно, отсюда получаем:

$$1 \text{ Кл} \approx 2,997924 \cdot 10^9 \text{ ед. зар. СГС,}$$

$$1 \text{ В} = \frac{1 \text{ эВ}}{e} \approx \frac{1,602176 \cdot 10^{-19} \text{ Дж}}{e} =$$

$$= \frac{1,602176 \cdot 10^{-12} \text{ эрг}}{4,803204 \cdot 10^{-10} \text{ ед. зар. СГС}} = \frac{1}{299,7924} \text{ ед. пот. СГС,}$$

$$1 \text{ Ом} = \frac{1 \text{ В}}{1 \text{ А}} = \frac{1 \text{ В}}{1 \text{ Кл/с}} \approx \frac{1}{(2,997924)^2} \cdot 10^{-11} \text{ с / см.}$$

В результате:

$$1/c \approx 29,97924 \text{ Ом.} \quad (3.117)$$

Эта мировая постоянная играет заметную роль в задачах излучения и приёма радиоволн – она служит оценкой для «сопротивления вакуума», которое выступает, образно говоря, как нагрузочное сопротивление для передающих антенн или сопротивление источника сигнала для приёмных антенн. Из этой оценки (в которую, конечно, могут входить безразмерные множители, скажем, 4π) следует, что для согласования антенн с приёмно-передающими устройствами волновое сопротивление соединительных кабелей должно иметь порядок величины (3.117), то есть, как правило, десятки или сотни ом. Как видно, сопротивление (3.117) не имеет прямого отношения к интересующему нас эффекту Холла.

Помимо скорости света известно ещё одно характерное значение скорости, составленное из мировых постоянных: e^2/\hbar . Обратной величине отвечает значение сопротивления, которое можно представить в виде $\text{Const} \cdot \hbar/e^2$, где Const – какое-либо безразмерное число. В формуле квантованного холловского сопротивления (3.109) присутствует выражение именно этого типа: $2\pi\hbar/e^2 = h/e^2$. Мы легко получим его численное значение в омах, если учтём результат (3.117) и тот факт, что отношение скорости e^2/\hbar к скорости света c есть известная *постоянная тонкой структуры* α :

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} \approx \frac{1}{137,036}. \quad (3.118)$$

Таким образом,

$$\frac{h}{e^2} = \frac{1}{c} \frac{2\pi}{\alpha} \approx 25812,80 \text{ Ом}. \quad (3.119)$$

Поскольку прецизионные измерения квантованного холловского сопротивления позволяют определить величину h/e^2 с высокой точностью, такие измерения находят применение для уточнения значения постоянной тонкой структуры; кроме того, они используются в метрологии для калибровки эталонных сопротивлений.

3.5.3. Измерение холловского сопротивления

В дальнейшем обсуждении мы будем полагать, что схема измерения и выбор направления координатных осей соответствуют показанным на рис. 3.13. Пусть, в соответствии с рис. 3.13, магнитное поле \mathbf{B} имеет только z -составляющую, а вектор плотности электрического \mathbf{j} тока направлен вдоль x ; предполагаем, что плотность тока в середине образца распределяется однородно. Кроме

того, ограничимся рассмотрением полупроводников с кубической кристаллической решёткой. Тогда линейные соотношения между компонентами векторов плотности тока и напряжённости электрического поля \mathbf{E} , имеющие в общем случае вид

$$E_k = \sum_n \rho_{kn}(\mathbf{B}) j_n, \quad k, n = x, y, z, \quad (3.120)$$

запишутся в форме двух равенств:

$$E_x = \rho_{xx} j_x,$$

$$E_y = \rho_{yx} j_x.$$

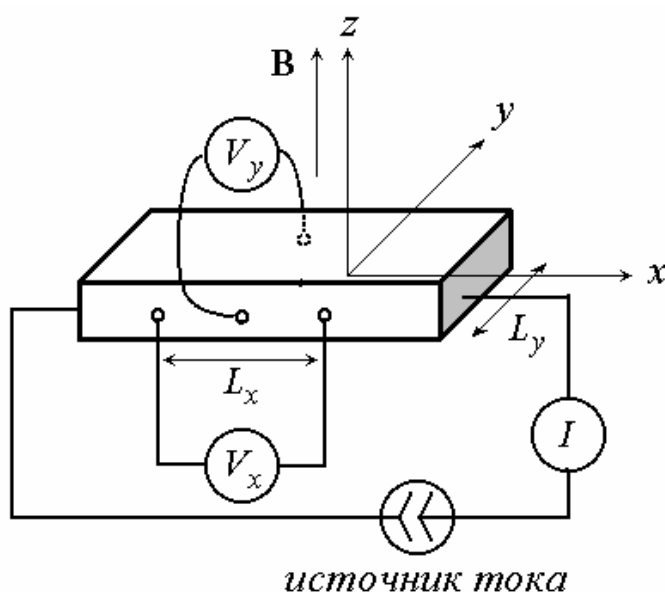


Рис. 3.13. Схема измерения напряжения Холла V_y и продольного падения напряжения V_x на образце, имеющем форму прямоугольного параллелепипеда или плёнки

Первое из них описывает продольное падение напряжения на образце, $V_x = E_x L_x$, где L_x – расстояние между потенциальными контактами. Второе равенство аналогичным образом описывает

холловскую разность потенциалов $V_y = E_y L_y$. Величины ρ_{kn} – это компоненты тензора удельного электросопротивления.

Выразим измеряемые электрические напряжения через заданное значение силы тока I , протекающего вдоль образца. В случае объёмного образца (трёхмерная система) плотность тока есть $j_x = I / (L_y L_z)$, где $L_y L_z$ – площадь поперечного сечения образца; поэтому мы получим:

$$V_x = R_L I, \quad R_L = \rho_{xx} \frac{L_x}{L_y L_z}, \quad (3.121)$$

$$V_y = R_H I, \quad R_H = \rho_{yx} \frac{1}{L_z}, \quad (3.122)$$

где R_L – продольное сопротивление, R_H – холловское сопротивление.

В двумерном случае, то есть в условиях, когда вследствие размерного квантования носители заряда в образце утрачивают свободу движения вдоль оси z , плотность тока определяется выражением $j_x = I / L_y$, где L_y – поперечный линейный размер образца в направлении, параллельном слою с двумерным газом носителей и перпендикулярном направлению тока. При этом размерность плотности тока есть $[j] = [I] / [L]$. Тогда вместо (3.121) – (3.122) получим:

$$V_x = R_L I, \quad R_L = \rho_{xx} \frac{L_x}{L_y}, \quad (3.123)$$

$$V_y = R_H I, \quad R_H = \rho_{yx}. \quad (3.124)$$

Выше мы уже выяснили, что в двумерном случае сопротивление и удельное сопротивление имеют одинаковую размерность. Теперь же обращает на себя внимание тот факт, что холловское

сопротивление двумерного электронного газа совпадает с удельным сопротивлением, то есть не зависит от размеров образца. Продольное сопротивление (3.123) зависит от отношения размеров L_x / L_y , но эта зависимость перестает быть существенной в области плато холловского сопротивления, поскольку, как видно из экспериментальных данных по КЭХ, $R_L \rightarrow 0$ при $T \rightarrow 0$ К, то есть $\rho_{xx} \rightarrow 0$. Отсюда же видно, что в области плато $E_x \rightarrow 0$, и поэтому векторы \mathbf{E} и \mathbf{j} (а также \mathbf{B}) становятся взаимно ортогональными.

3.5.4. Циклотронная орбита электрона

Рассмотрим в рамках классической механики решение хорошо известной задачи о движении электрона в магнитном поле. Классическая картина позволит нам в дальнейшем лучше понять результаты квантово-механического рассмотрения.

Частица с массой m и электрическим зарядом e , движущаяся в магнитном поле \mathbf{B} со скоростью \mathbf{v} , испытывает действие силы Лоренца $(e/c)[\mathbf{v} \times \mathbf{B}]$, где \times – знак векторного произведения. Запишем классическое уравнение динамики (уравнение Ньютона) для радиус-вектора частицы $\mathbf{r}(t)$:

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = \frac{e}{c} [\mathbf{v} \times \mathbf{B}]. \quad (3.125)$$

Обозначим посредством \mathbf{e}_x , \mathbf{e}_y , \mathbf{e}_z единичные орты в направлении координатных осей. Пусть $\mathbf{B} = B \mathbf{e}_z$. Разделим левую и правую стороны уравнения (3.125) на массу m , так что теперь правая часть уравнения Ньютона будет представлять силу в расчёте на единицу массы, и введём обозначение $\omega_c = eB/mc$ (циклотронная частота); получим:

$$\frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = \omega_c [\mathbf{v} \times \mathbf{e}_z]. \quad (3.126)$$

Разложим векторы $\mathbf{r}(t)$ и $\mathbf{v}(t)$ на проекции вдоль координатных ортов, считая, что частица движется в плоскости x, y ,

$$\mathbf{r}(t) = x(t)\mathbf{e}_x + y(t)\mathbf{e}_y,$$

$$\mathbf{v}(t) = \frac{dx}{dt}\mathbf{e}_x + \frac{dy}{dt}\mathbf{e}_y,$$

и учтём, что $\mathbf{e}_x \times \mathbf{e}_z = -\mathbf{e}_y$, $\mathbf{e}_y \times \mathbf{e}_z = \mathbf{e}_x$. Тогда уравнение Ньютона (3.126) примет вид

$$\frac{d^2 x}{dt^2}\mathbf{e}_x + \frac{d^2 y}{dt^2}\mathbf{e}_y = -\omega_c \frac{dx}{dt}\mathbf{e}_y + \omega_c \frac{dy}{dt}\mathbf{e}_x.$$

Этому векторному уравнению эквивалентна система двух обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка, связанных друг с другом:

$$\frac{d^2 x}{dt^2} = \omega_c \frac{dy}{dt}, \quad (3.127)$$

$$\frac{d^2 y}{dt^2} = -\omega_c \frac{dx}{dt}. \quad (3.128)$$

Интегрируя эти уравнения по времени и обозначая постоянную интегрирования в первом из них как $-\omega_c y_0$, а во втором как $\omega_c x_0$, приходим к уравнениям первого порядка:

$$\frac{dx}{dt} = \omega_c (y(t) - y_0), \quad (3.129)$$

$$\frac{dy}{dt} = -\omega_c (x(t) - x_0). \quad (3.130)$$

Теперь подставим (3.130) в правую часть уравнения (3.127). Тем самым мы получаем хорошо известное в механике уравнение линейного осциллятора, которое можно записать следующим образом:

$$\frac{d^2(x - x_0)}{dt^2} = -\omega_c^2 (x - x_0). \quad (3.131)$$

Его решение имеет вид гармонического колебания координаты $x(t)$ относительно точки x_0 с частотой ω_c с произвольной амплитудой C и с произвольной начальной фазой δ :

$$x(t) = x_0 + C \cos(\omega_c t + \delta). \quad (3.132)$$

Используя этот результат в выражении $y - y_0 = (1/\omega_c) dx/dt$, которое следует из уравнения (3.129), имеем окончательно:

$$y(t) = y_0 - C \sin(\omega_c t + \delta). \quad (3.133)$$

Найденное общее решение (3.132)–(3.133) двух уравнений второго порядка (3.127)–(3.128) содержит, как и должно быть, четыре произвольные постоянные: x_0 , y_0 , C , δ .

Таким образом, в магнитном поле заряженная частица вращается по окружности с частотой ω_c , см. рис. 3.14. Положение центра этой окружности, называемой *циклотронной орбитой*, задаётся начальными условиями. Радиус C циклотронной орбиты произволен в меру произвольности начальной скорости частицы.

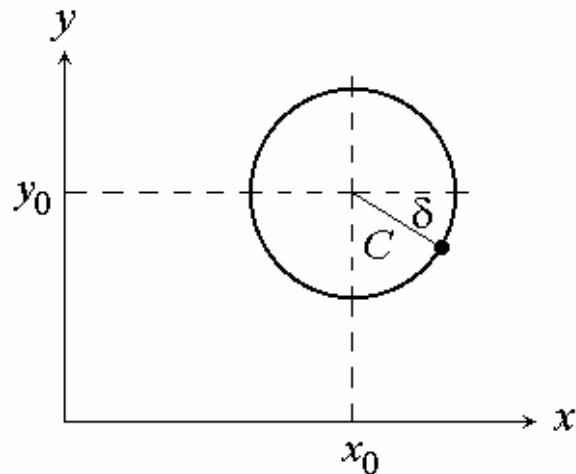


Рис. 3.14. Циклотронная орбита заряженной частицы в магнитном поле \mathbf{B} , параллельном оси z .

Центр орбиты расположен в точке с координатами x_0, y_0 ; C – радиус орбиты, угол δ – начальная фаза вращения частицы по орбите. Если частица имеет отрицательный заряд, то она движется по орбите в направлении против часовой стрелки; в случае положительного заряда – по часовой стрелке

Действительно,

$$v_x(t) = dx/dt = -\omega_c C \sin(\omega_c t + \delta),$$

$$v_y(t) = dy/dt = -\omega_c C \cos(\omega_c t + \delta),$$

так что

$$|\mathbf{v}| = \sqrt{v_x^2 + v_y^2} = \omega_c C.$$

Отметим также, что результат (3.132) – (3.133) можно записать в векторной форме:

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}_0 + \mathbf{r}_c(t), \quad (3.134)$$

где \mathbf{r}_0 – радиус-вектор неподвижного центра (x_0, y_0) циклотронной орбиты, $\mathbf{r}_c(t)$ – вектор положения частицы на циклотронной орбите,

отсчитанный относительно её центра (этот вектор вращается с частотой ω_c , а его величина равна радиусу орбиты C).

3.5.5. Дрейф электронов в скрещенных полях

Пусть теперь наряду с постоянным магнитным полем $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$, направленным вдоль оси z , на частицу в плоскости её движения (x, y) действует постоянное электрическое поле \mathbf{E} :

$$\mathbf{E} = E_x \mathbf{e}_x + E_y \mathbf{e}_y.$$

Тогда, добавив в правую часть уравнения (3.126) вклад электрического поля $e\mathbf{E}/m$, мы вместо уравнений (3.127) – (3.128) получим:

$$\frac{d^2 x}{dt^2} = \omega_c \frac{dy}{dt} + \frac{e}{m} E_x, \quad (3.135)$$

$$\frac{d^2 y}{dt^2} = -\omega_c \frac{dx}{dt} + \frac{e}{m} E_y. \quad (3.136)$$

Проинтегрируем эти уравнения:

$$\frac{dx}{dt} = \omega_c \left(y(t) - y_0 + \frac{c E_x}{B} t \right), \quad (3.137)$$

$$\frac{dy}{dt} = -\omega_c \left(x(t) - x_0 - \frac{c E_y}{B} t \right), \quad (3.138)$$

и подставим результат (3.138) в правую сторону уравнения (3.135); получим:

$$\frac{d^2 x}{dt^2} = -\omega_c^2 \left(x(t) - x_0 - \frac{c E_y}{B} t \right) + \frac{e}{m} E_x.$$

Включив не зависящую от времени величину eE_x/m в постоянную интегрирования x_0 , можно написать получившееся уравнение в виде уравнения гармонического осциллятора:

$$\frac{d^2 X}{dt^2} = -\omega_c^2 X,$$

где

$$X(t) = x(t) - x_0 - \frac{c E_y}{B} t.$$

Поскольку решением уравнения осциллятора является функция $X(t) = C \cos(\omega_c t + \delta)$, имеем:

$$x(t) = x_0 + \frac{c E_y}{B} t + C \cos(\omega_c t + \delta). \quad (3.139)$$

Взяв от этого выражения производную по времени и включив величину eE_y/m в постоянную интегрирования y_0 , найдем с помощью уравнения (3.137) искомое выражение для $y(t)$:

$$y(t) = y_0 - \frac{c E_x}{B} t - C \sin(\omega_c t + \delta). \quad (3.140)$$

Результат (3.139) – (3.140) можно представить в векторной форме:

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}_0 + \mathbf{r}_c(t) + \mathbf{v}_E t, \quad (3.141)$$

где

$$\mathbf{v}_E = \frac{c E_y}{B} \mathbf{e}_x - \frac{c E_x}{B} \mathbf{e}_y. \quad (3.142)$$

Сравнение формул (3.141) и (3.134) показывает, что в присутствии электрического поля \mathbf{E} , перпендикулярного магнитному полю \mathbf{B} , центр циклотронной орбиты «дрейфует» – движется в плоскости, перпендикулярной магнитному полю, с постоянной скоростью \mathbf{v}_E . Скалярное произведение векторов \mathbf{v}_E и \mathbf{E} равно нулю:

$$\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}_E = E_x v_{E,x} + E_y v_{E,y} = \frac{cE_x E_y}{B} - \frac{cE_y E_x}{B} = 0.$$

Это означает, что векторы \mathbf{v}_E и \mathbf{E} взаимно ортогональны, то есть циклотронная орбита дрейфует в направлении, перпендикулярном электрическому полю.

Рассмотренная классическая модель движения электрона в скрещенных полях \mathbf{B} и \mathbf{E} уже может быть ассоциирована с картиной эффекта Холла (обычного, не квантового) в пределе сильного магнитного поля \mathbf{B} . Дрейфу носителей заряда со скоростью \mathbf{v}_E соответствует отличная от нуля плотность тока в образце $\mathbf{j} = en\mathbf{v}_E$, где n – концентрация носителей. Здесь электрическое поле \mathbf{E} , перпендикулярное векторам \mathbf{j} и \mathbf{B} , интерпретируется как холловское поле, соответствующее холловской разности потенциалов (V_H) на образце.

Эта картина имеет отношение как к двумерному движению (тогда надо полагать, что n есть n_S – двумерная концентрация электронов), так и к движению в трёхмерном пространстве с равной нулю составляющей скорости v_z вдоль оси z . Рассмотренные выше скрещенные поля \mathbf{B} и \mathbf{E} не создают сил вдоль оси z , поэтому движение электрона вдоль оси z в данной модели не зависит от полей \mathbf{B} и \mathbf{E} , а определяется только начальными условиями; при $v_z \neq 0$ оно может быть лишь равномерным прямолинейным. Далее мы будем считать, что рассматривается двумерный случай, и не станем учитывать движение вдоль оси z .

3.5.6. Учёт рассеяния электронов на примесях

Если векторы плотности тока и электрического поля взаимно ортогональны, как получилось в предыдущей модели эффекта Холла, то продольная по отношению к току разность потенциалов на образце (V_L) равна нулю. Убедимся теперь в том, что рассеяние носителей тока приводит к появлению продольной компоненты электрического поля, то есть – к появлению $V_L \neq 0$.

Для того чтобы учесть рассеяние простейшим способом, включим в правую часть уравнения Ньютона «силу трения», пропорциональную дрейфовой скорости и направленную ей навстречу: $-m\mathbf{v}_E/\tau$; сила трения в расчёте на единицу массы будет равна $-\mathbf{v}_E/\tau$, и интересующее нас уравнение Ньютона запишется в виде:

$$\frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} = \omega_c [\mathbf{v} \times \mathbf{e}_z] + \frac{e\mathbf{E}}{m} - \frac{\mathbf{v}_E}{\tau}. \quad (3.143)$$

Параметр τ с размерностью времени здесь имеет смысл времени релаксации дрейфовой скорости. Действительно, если выключить магнитное и электрическое поля (то есть положить $\omega_c = 0$, $\mathbf{E} = 0$), то уравнение (3.143) примет вид $d\mathbf{v}/dt = -\mathbf{v}/\tau$, а его решение, $\mathbf{v}(t) = \mathbf{v}(0)\exp(-t/\tau)$, будет описывать экспоненциальную релаксацию скорости частицы к нулевому значению с характерным временем τ .

Решение уравнения (3.143) попробуем искать в форме (3.141) с некоторым постоянным вектором \mathbf{v}_E :

$$\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}_0 + \mathbf{r}_c(t) + \mathbf{v}_E t, \quad (3.144)$$

тогда:

$$\mathbf{v}(t) = \frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{d\mathbf{r}_c}{dt} + \mathbf{v}_E, \quad \frac{d^2\mathbf{r}}{dt^2} = \frac{d^2\mathbf{r}_c}{dt^2}.$$

Подставив эти выражения в уравнение (3.143), приведём его к виду:

$$\frac{d^2 \mathbf{r}_c}{dt^2} = \omega_c \left[\frac{d\mathbf{r}_c}{dt} \times \mathbf{e}_z \right] + \omega_c [\mathbf{v}_E \times \mathbf{e}_z] + \frac{e\mathbf{E}}{m} - \frac{\mathbf{v}_E}{\tau}. \quad (3.145)$$

Поскольку вектор $\mathbf{r}_c(t)$, описывающий вращение частицы по циклотронной орбите, заведомо удовлетворяет уравнению

$$\frac{d^2 \mathbf{r}_c}{dt^2} = \omega_c \left[\frac{d\mathbf{r}_c}{dt} \times \mathbf{e}_z \right],$$

то уравнение (3.145) сводится к равенству

$$\omega_c [\mathbf{v}_E \times \mathbf{e}_z] + \frac{e\mathbf{E}}{m} - \frac{\mathbf{v}_E}{\tau} = 0. \quad (3.146)$$

Это равенство представляет собой алгебраическое соотношение (а не дифференциальное уравнение) между вектором электрического поля \mathbf{E} и вектором дрейфовой скорости электрона \mathbf{v}_E , поэтому его можно решить как относительно \mathbf{v}_E при заданном \mathbf{E} , так и наоборот – относительно \mathbf{E} при заданном векторе \mathbf{v}_E .

В эксперименте по наблюдению эффекта Холла (вспомним рис. 3.13) в двумерной системе заданной является плотность тока $\mathbf{j} = en_S \mathbf{v}_E$, а направление и величина электрического поля \mathbf{E} зависят от свойств образца. Подставляя в (3.146) выражения $\omega_c = eB/mc$ и $\mathbf{v}_E = \mathbf{j}/(en_S)$, приходим к следующему соотношению между \mathbf{E} и \mathbf{j} :

$$\mathbf{E} = \frac{m}{e^2 n_S \tau} \mathbf{j} - \frac{B}{en_S c} [\mathbf{j} \times \mathbf{e}_z]. \quad (3.147)$$

Введём обозначение

$$\sigma_0 = \frac{e^2 n_S \tau}{m}, \quad (3.148)$$

разложим в (3.147) вектор \mathbf{j} на составляющие вдоль координатных осей x и y (не предполагая пока, что ось x выбирается в направлении вектора плотности тока \mathbf{j}), $\mathbf{j} = j_x \mathbf{e}_x + j_y \mathbf{e}_y$, и выпишем возникающие таким образом формулы для компонент вектора электрического поля:

$$E_x = \frac{1}{\sigma_0} j_x + \frac{-B}{enc} j_y, \quad (3.149)$$

$$E_y = \frac{B}{enc} j_x + \frac{1}{\sigma_0} j_y. \quad (3.150)$$

Если ось x выбрана в направлении электрического тока, то в этих формулах следует положить $j_y = 0$, $j_x = |\mathbf{j}|$. Из соотношений (3.149) – (3.150) непосредственно видны выражения для компонент тензора удельного сопротивления $\hat{\rho}$ – это коэффициенты при j_x и j_y :

$$\hat{\rho} = \begin{pmatrix} \rho_{xx} & \rho_{xy} \\ \rho_{yx} & \rho_{yy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sigma_0} & -\frac{B}{en_S c} \\ \frac{B}{en_S c} & \frac{1}{\sigma_0} \end{pmatrix}. \quad (3.151)$$

Согласно формулам (3.123) – (3.124), продольное и холловское сопротивления двумерной системы в данной модели принимают следующие значения:

$$R_L = \rho_{xx} \frac{L_x}{L_y} = \frac{1}{\sigma_0} \frac{L_x}{L_y}, \quad (3.152)$$

$$R_H = \rho_{yx} = \frac{B}{en_S c}. \quad (3.153)$$

В отсутствие рассеяния имеем $\tau \rightarrow \infty$, так что $1/\sigma_0 \rightarrow 0$, и тогда $R_L \rightarrow 0$. Следовательно, резкое уменьшение продольного сопротивления в области плато холловского сопротивления при наблюдении КЭХ можно пытаться объяснить подавлением процессов рассеяния. Однако наличие плато на зависимости $R_H(B)$ не находит своего объяснения в классической модели: согласно (3.153) холловское сопротивление $R_H(B)$ должно расти с увеличением магнитного поля B (и должно убывать с увеличением концентрации электронов n_S).

Линейная связь между \mathbf{E} и \mathbf{j} может быть представлена и как зависимость \mathbf{j} от \mathbf{E} :

$$j_k = \sum_n \sigma_{kn}(\mathbf{B}) E_n, \quad k, n = x, y, z, \quad (3.154)$$

где σ_{kn} – компоненты тензора проводимости. Матрица $\hat{\sigma}$ является обратной матрицей для матрицы тензора удельного сопротивления $\hat{\rho}$, то есть

$$\sum_n \sigma_{kn} \rho_{nl} = \delta_{kl} \equiv \begin{cases} 1, & k=l \\ 0, & k \neq l \end{cases}.$$

В двумерном случае это означает, что

$$\begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\rho_{yy}}{\rho_{xx}\rho_{yy} - \rho_{xy}\rho_{yx}} & \frac{-\rho_{xy}}{\rho_{xx}\rho_{yy} - \rho_{xy}\rho_{yx}} \\ \frac{-\rho_{yx}}{\rho_{xx}\rho_{yy} - \rho_{xy}\rho_{yx}} & \frac{\rho_{xx}}{\rho_{xx}\rho_{yy} - \rho_{xy}\rho_{yx}} \end{pmatrix}.$$

Подставив сюда значения компонент тензора сопротивления (3.151) или разрешив уравнение (3.147) относительно вектора \mathbf{j} , получим:

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \frac{e^2 n_S \tau}{m} \frac{1}{1 + \omega_c^2 \tau^2}, \quad (3.155)$$

$$\sigma_{xy} = -\sigma_{yx} = \frac{e^2 n_S \tau}{m} \frac{\omega_c \tau}{1 + \omega_c^2 \tau^2}. \quad (3.156)$$

Из этих формул видно, что в нулевом магнитном поле ($\omega_c = 0$) недиагональные компоненты тензора проводимости (и тензора удельного сопротивления) обращаются в ноль, а диагональные компоненты ($\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$) будут равны величине σ_0 , которая определяется равенством (3.148); другими словами, σ_0 – это проводимость в отсутствие магнитного поля. В присутствии магнитного поля, но в отсутствие рассеяния ($\tau \rightarrow \infty$) в ноль обращаются диагональные компоненты тензора проводимости (и тензора удельного сопротивления), а недиагональные компоненты принимают значения $\sigma_{xy} = -\sigma_{yx} = en_S c / B$.

На рис. 3.15 приведено наглядное пояснение роли рассеяния в появлении отличного от нуля продольного сопротивления. В отсутствие рассеяния траектория частицы имеет стационарный характер – дрейф с вращением по циклотронной орбите. Дискретным актам рассеяния отвечают переходы положительно заряженной частицы на смещённые вдоль поля \mathbf{E} отрезки стационарных

траекторий. В результате, у вектора тока \mathbf{j} появляется составляющая вдоль поля \mathbf{E} , а если условиями опыта направление тока фиксировано (ток течёт вдоль образца), то следует считать, что у вектора поля \mathbf{E} появляется составляющая вдоль тока \mathbf{j} .

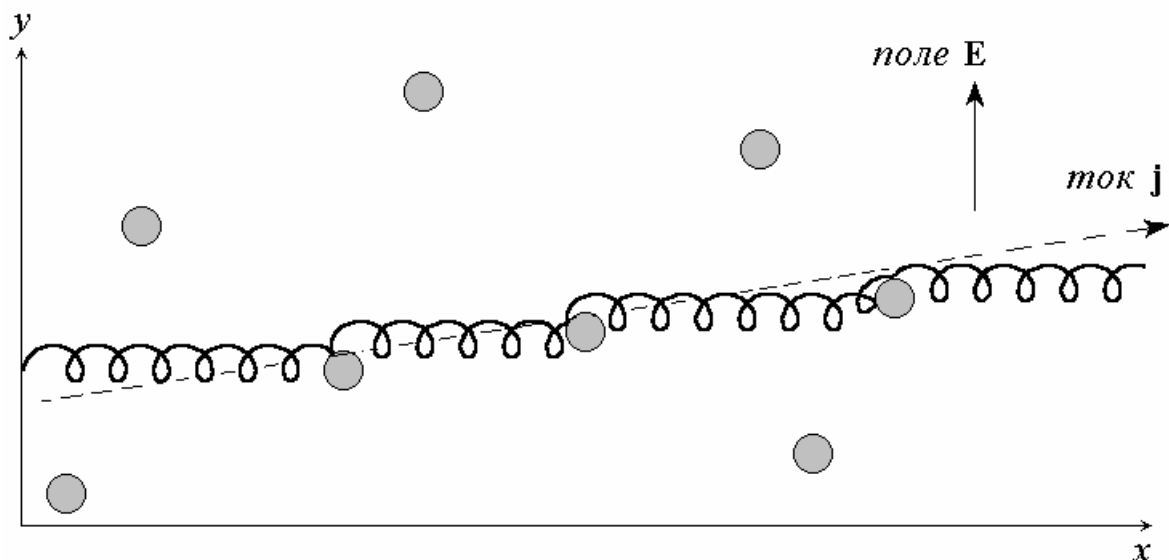


Рис. 3.15. Дрейф и рассеяние заряженной частицы в скрещенных магнитном и электрическом полях при $\omega_c \tau \gg 1$.

Магнитное поле \mathbf{B} направлено вдоль оси z , электрическое поле \mathbf{E} – параллельно оси y . Положительно заряженная частица вращается по часовой стрелке и дрейфует вдоль оси x слева направо, изредка испытывая столкновения с рассеивающими центрами (они показаны тёмными кружками). Вследствие столкновений отрезки траектории смещаются в направлении поля \mathbf{E} . Поэтому усреднённый вдоль траектории вектор тока \mathbf{j} и вектор поля \mathbf{E} составляют угол, меньший чем $\pi/2$. Значит, у вектора \mathbf{E} имеется отличная от нуля составляющая в направлении тока \mathbf{j} ; ей отвечает падение напряжения на образце. Поперечная к току составляющая поля \mathbf{E} должна быть интерпретирована как холловское поле

Такой же вывод справедлив и в случае отрицательно заряженной частицы – электрона. Формула (3.142) показывает, что направление дрейфа не зависит от знака заряда частицы. В условиях, показанных на рис. 3.15, электрон будет вращаться против часовой стрелки и дрейфовать слева направо. Тогда акты рассеяния приведут к смещению отрезков траектории в направлении $-\mathbf{E}$. Но направление

электрического тока, создаваемого отрицательно заряженной частицей, противоположно направлению её траектории. Значит, и в случае электрона вследствие актов рассеяния величина угла между \mathbf{E} и \mathbf{j} оказывается меньшей, чем $\pi/2$, то есть у поля \mathbf{E} появляется составляющая вдоль тока \mathbf{j} .

Отметим, что в этой модели движения носителей заряда не учитывалась дисперсия частиц по скоростям. Поскольку частицы, движущиеся с различными скоростями, дают суммарный вклад в плотность тока \mathbf{j} (а не в поле \mathbf{E}), то для учёта дисперсии следует считать, что в (3.154) входят усреднённые значения тензора проводимости:

$$\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \frac{e^2 n_S}{m} \left\langle \frac{\tau}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \right\rangle, \quad (3.157)$$

$$\sigma_{xy} = -\sigma_{yx} = \frac{e^2 n_S}{m} \left\langle \frac{\omega_c \tau^2}{1 + \omega_c^2 \tau^2} \right\rangle. \quad (3.158)$$

Здесь угловые скобки означают усреднение по скоростям, причём функцией, зависящей от скорости (точнее – от энергии частицы ε), является время релаксации $\tau(\varepsilon)$. Однако в пределе низких температур ($T \rightarrow 0$) усреднение сводится к замене функции $\tau(\varepsilon)$ её значением τ на уровне Ферми; тем самым мы возвращаемся к выражениям для тензора проводимости и тензора удельного электросопротивления, полученным без учёта дисперсии.

3.5.7. Квантовые состояния электрона в скрещенных полях

Более последовательный анализ движения электронов должен опираться на законы квантовой механики, поэтому теперь мы будем решать уравнение Шредингера. Цель – найти энергетический спектр и

волновые функции размерно-квантованных стационарных состояний частицы с зарядом e в присутствии взаимно перпендикулярных полей \mathbf{B} и \mathbf{E} :

$$\mathbf{B} = B \mathbf{e}_z = \nabla \times \mathbf{A}, \quad \mathbf{E} = E \mathbf{e}_y = (-1/e) \nabla U. \quad (3.159)$$

Выражения для векторного потенциала \mathbf{A} и скалярного потенциала U/e (где U – потенциальная энергия, $e = -|e| < 0$ – заряд электрона) выберем следующим образом:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = -y B \mathbf{e}_x, \quad (3.160)$$

$$U(\mathbf{r}) = -y e E \quad (3.161)$$

и подставим их в уравнение Шредингера:

$$\frac{1}{2m} \left(-i\hbar \nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \right)^2 \psi(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) + 2\mu_e s_z B \psi(\mathbf{r}) = \varepsilon \psi(\mathbf{r}). \quad (3.162)$$

Здесь последнее слагаемое, содержащее магнитный момент электрона μ_e , описывает двукратное расщепление энергетических уровней (эффект Зеемана) в соответствии с двумя допустимыми значениями проекции электронного спина $s_z = \pm 1/2$.

Для простоты мы будем рассматривать только одну серию уровней – с фиксированным значением s_z – и поэтому в дальнейшем не станем выписывать зеемановскую добавку к энергии $2\mu_B s_z B$. Кроме того, будем считать, что уравнение (3.161) описывает движение электрона в квантовой яме, причём оно уже представляет собой результат разделения переменных z и x, y . Движение электрона вдоль z «заморожено» размерным квантованием, так что волновая функция $\psi(\mathbf{r})$ зависит только от x и y :

$$\left[\frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - \frac{e}{c} A_x(y) \right)^2 + \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} \right)^2 + U(y) \right] \psi(x, y) = \varepsilon \psi(x, y).$$

Ищем решение в виде:

$$\psi(x, y) = \exp(ik_x x) \varphi(y), \quad (3.163)$$

где k_x – волновой вектор, соответствующий свободному движению электрона в направлении оси x . Тогда для неизвестной функции $\varphi(y)$ получим:

$$\left[\frac{1}{2m} \left(\hbar k_x + \frac{eyB}{c} \right)^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} - yeE \right] \varphi(y) = \varepsilon \varphi(y).$$

Поскольку здесь гамильтониан зависит от координаты y квадратично, это уравнение приводится к виду уравнения Шредингера для стационарных состояний линейного гармонического осциллятора:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dy^2} + \frac{1}{2} m \omega_c^2 (y - y_0)^2 \right] \varphi(y) = (\varepsilon - \Delta\varepsilon_{k_x}) \varphi(y), \quad (3.164)$$

где мы ввели обозначения:

$$y_0 = \frac{eE}{m\omega_c^2} - \frac{\hbar k_x}{m\omega_c}, \quad (3.165)$$

$$\Delta\varepsilon_{k_x} = \frac{cE}{B} \hbar k_x - \frac{e^2 E^2}{2m\omega_c^2}. \quad (3.166)$$

Решение квантовой задачи о гармоническом осцилляторе хорошо известно из курса квантовой механики. Волновые функции $\varphi(y)$ зависят от квантового числа $N = 0, 1, 2, \dots$, а также от волнового числа k_x (через y_0) и имеют следующий вид:

$$\varphi_{N, k_x}(y - y_0) = \frac{1}{\sqrt{l_B \pi^{1/2} 2^N N!}} \exp\left(-\frac{(y - y_0)^2}{2l_B^2}\right) H_N\left(\frac{y - y_0}{l_B}\right),$$

где $H_N(x)$ – полиномы Эрмита степени N . Посредством l_B обозначен характерный для данной задачи масштаб длины, зависящий от величины магнитного поля B и называемый *магнитной длиной*:

$$l_B = \sqrt{\frac{\hbar}{m|\omega_c|}} = \sqrt{\frac{\hbar c}{|e|B}}. \quad (3.167)$$

При этом уровни энергии стационарных состояний с заданным k_x образуют на шкале энергии «лестницу» с шагом, равным $\hbar\omega_c$:

$$\varepsilon_{N, k_x} = \Delta\varepsilon_{k_x} + \hbar\omega_c(N + 1/2), \quad N = 0, 1, 2, \dots \quad (3.168)$$

Полные волновые функции (3.163), принадлежащие собственным значениям энергии (3.168) и нормированные на единицу в прямоугольнике с размерами $L_x, L_y \gg l_B$, имеют вид

$$\Psi_{N, k_x}(x, y) = L_x^{-1/2} \exp(ik_x x) \varphi_{N, k_x}(y - y_0). \quad (3.169)$$

Сравним полученный результат с классической картиной, полагая для начала, что электрическое поле выключено ($E = 0$). В рамках классической механики частица в магнитном поле вращается с частотой ω_c по циклотронной орбите произвольного радиуса с произвольной кинетической энергией, определяемой начальными

условиями. Поскольку вращение можно разложить на два взаимно перпендикулярных гармонических колебания, то появление уравнения осциллятора в квантовой задаче вполне ожидаемо. Однако квантовый осциллятор существенно отличается от классического. Во-первых, энергетический спектр осциллятора в квантовой задаче дискретен – он состоит из серии *уровней Ландау*, отделённых друг от друга энергетической щелью $\hbar\omega_c$:

$$\varepsilon_N = \hbar\omega_c(N + 1/2), \quad N = 0, 1, 2, \dots \quad (3.170)$$

Во-вторых, в квантовой задаче возникает новый масштаб длины – магнитная длина (3.167). Согласно принципу неопределённости, движение квантовой частицы не описывается на языке траекторий $\mathbf{r}(t)$, а характеризуется распределением вероятности $|\psi_{N, k_x}(x, y)|^2$ для координат \mathbf{r} . Магнитная длина l_B является оценкой линейного размера «облака» вероятности: волновая функция (3.169) резко убывает в области $|y - y_0| \gg l_B$. Тот факт, что в функцию (3.169) координаты x и y входят не симметрично, связан с выбором калибровки векторного потенциала (3.160), в которой выделена роль координаты y . Можно показать, что при выборе векторного потенциала в виде $\mathbf{A} = [\mathbf{B} \times \mathbf{r}]/2$, модуль волновой функции имеет аксиальную симметрию и убывает в любом направлении в области $(x^2 + y^2)^{1/2} \gg l_B$. Таким образом, для качественных оценок допустимо рассматривать магнитную длину l_B (точнее – величину $\sqrt{2N+1} l_B$) как размер «циклотронной орбиты» в квантовом случае.

Важным свойством уровней Ландау (3.170) является высокая кратность их вырождения. Действительно, значения энергии ε_N не зависят от квантового числа k_x , тогда как волновые функции (3.169) существенно зависят от k_x , поскольку k_x входит в параметр y_0 :

$$y_0|_{\mathbf{E}=0} = -\frac{\hbar k_x}{m \omega_c} = \frac{k_x \hbar c}{|e| B} = k_x l_B^2. \quad (3.171)$$

Видно, что квантовым числом k_x задаётся координата y_0 центра облака вероятности. И в классической, и в квантовой картине положение центра циклотронной орбиты является произвольным (в силу произвольности начальных условий). Поскольку центр орбиты всё же должен находиться внутри образца, то координата (3.171) подчиняется условиям:

$$-L_y/2 < y_0 < L_y/2,$$

так что k_x принимает значения в интервале величиной $L_y |e| B / \hbar c$:

$$-\frac{L_y |e| B}{2\hbar c} < k_x < \frac{L_y |e| B}{2\hbar c}. \quad (3.172)$$

Кроме того, в квантовой задаче возникает ещё одно условие для k_x , вытекающее из граничного условия, налагаемого на волновую функцию. Для того чтобы учесть конечный размер образца в направлении оси x , надо подчинить волновую функцию (3.169) граничному условию периодичности по x :

$$\Psi_{N, k_x}(x + L_x, y) = \Psi_{N, k_x}(x, y). \quad (3.173)$$

Отсюда следует, что k_x принимает дискретные значения, кратные $2\pi/L_x$. Разделив теперь полный интервал $L_y |e| B / \hbar c$ значений k_x на интервал $\Delta k_x = 2\pi/L_x$, приходящийся на одно квантовое состояние, находим искомую кратность вырождения η уровня Ландау ε_N :

$$\eta = \frac{L_y |e| B / \hbar c}{2\pi / L_x} = \frac{L_x L_y B |e|}{2\pi \hbar c} = \frac{L_x L_y}{2\pi l_B^2}. \quad (3.174)$$

Примечательно, что найденная кратность вырождения может быть выражена в форме отношения магнитного потока Φ , пронизывающего площадь образца,

$$\Phi = B L_x L_y, \quad (3.175)$$

к так называемому *кванту потока* Φ_0 :

$$\Phi_0 = \frac{2\pi \hbar c}{|e|}, \quad (3.176)$$

то есть:

$$\eta = \Phi / \Phi_0. \quad (3.177)$$

В присутствии электрического поля \mathbf{E} к каждому уровню Ландау добавляется величина (3.166), содержащая линейный и квадратичный по E вклады в энергию уровня (эффект Штарка). За счёт линейного вклада $cE\hbar k_x / B$, пропорционального квантовому числу k_x , вырождение каждого из уровней Ландау снимается. Квадратичный вклад приводит к смещению энергетического спектра как целого, что не является существенным эффектом. Указанное снятие вырождения можно представить в виде наклона уровней Ландау от одного края образца к другому в направлении оси y (то есть в направлении \mathbf{E}), поскольку зависимость энергии от k_x эквивалентна зависимости уровня Ландау от координаты центра циклотронной орбиты y_0 . Разность значений энергии наклонённого таким образом уровня Ландау на краях образца равна $cE\hbar(k_{max} - k_{min}) / B$, где $k_{max} - k_{min}$ есть интервал изменения квантового числа k_x , который, как мы знаем, составляет $L_y |e| B / \hbar c$:

$$\frac{cE}{B} \hbar(k_{\max} - k_{\min}) = |e|E L_y = |e|V_y. \quad (3.178)$$

Проще говоря, наклон уровней Ландау соответствует изменению потенциальной энергии электрона (3.161) от одного края образца к другому, как и должно быть при наличии ненулевой поперечной разности потенциалов $V_y = E L_y$.

Для того чтобы интерпретировать разность потенциалов V_y как холловское напряжение, следует убедиться в том, что волновые функции (3.169) описывают в рамках квантового подхода такое движение электронов, которому в классической модели отвечает дрейф циклотронной орбиты вдоль оси x со скоростью cE/B . Из курса квантовой механики известно, что в присутствии магнитного поля квантово-механический оператор скорости частицы имеет следующий вид:

$$\hat{\mathbf{v}} = \frac{1}{m} \left(-i\hbar\nabla - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right).$$

Вычислим среднее значение скорости в направлении оси x для электрона в квантовом состоянии (3.169):

$$\begin{aligned} v_x &= \langle \Psi_{N,k_x} | \hat{v}_x | \Psi_{N,k_x} \rangle = \\ &= \int_{-L_x/2}^{L_x/2} dx \int_{-L_y/2}^{L_y/2} dy \Psi_{N,k_x}^* \frac{1}{m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} - \frac{e}{c} A_x \right) \Psi_{N,k_x} = \\ &= \int_{-L_x/2}^{L_x/2} dx \int_{-L_y/2}^{L_y/2} dy \Psi_{N,k_x}^* \frac{1}{m} \left(\hbar k_x + \frac{eB}{c} y \right) \Psi_{N,k_x}. \end{aligned}$$

С учётом нормировки волновой функции,

$$\int_{-L_x/2}^{L_x/2} dx \int_{-L_y/2}^{L_y/2} dy \psi_{N,k_x}^* \psi_{N,k_x} = \int_{-L_y/2}^{L_y/2} dy \varphi_{N,k_x}^2 = 1,$$

получим:

$$\begin{aligned} v_x &= \frac{\hbar k_x}{m} + \omega_c \int_{-L_y/2}^{L_y/2} dy y \varphi_{N,k_x}^2 = \\ &= \frac{\hbar k_x}{m} + \omega_c \int_{-L_y/2}^{L_y/2} dy (y - y_0 + y_0) \varphi_{N,k_x}^2 = \\ &= \frac{\hbar k_x}{m} + \omega_c \int_{-L_y/2}^{L_y/2} dy (y - y_0) \varphi_{N,k_x}^2 + \omega_c y_0. \end{aligned}$$

В последнем выражении интеграл обращается в ноль, так как $(y - y_0) \varphi_{N,k_x}^2$ представляет собой нечётную функцию аргумента $y - y_0$. Следовательно,

$$v_x = \frac{\hbar k_x}{m} + \omega_c y_0 = \frac{\hbar k_x}{m} + \frac{eE}{m\omega_c} - \frac{\hbar k_x}{m} = \frac{cE}{B},$$

где мы воспользовались формулой (3.165) для y_0 . Аналогично проверяется, что $v_y = 0$. Найденный результат для скорости v_x можно было бы получить и по формуле групповой скорости, если учесть зависимость энергии (3.166) от квантового числа k_x :

$$v_x = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_{N,k_x}}{\partial k_x} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \Delta \varepsilon_{N,k_x}}{\partial k_x} = \frac{cE}{B}. \quad (3.179)$$

Таким образом, в квантовом состоянии (3.169), принадлежащем N -му уровню Ландау, электрон дрейфует вдоль образца со скоростью $\mathbf{v}_E = (cE/B)\mathbf{e}_x$.

3.5.8. Отсутствие квантового эффекта Холла в идеальной системе

Рассмотренная выше квантовая модель движения электрона находится в соответствии с классическим представлением о дрейфе циклотронных орбит без рассеяния, и поэтому она приводит к классическому результату (3.153) для холловского сопротивления, причём продольное сопротивление в отсутствие рассеяния остаётся равным нулю. Действительно, движению двумерного электронного газа с концентрацией n_S со скоростью (3.179) отвечает плотность тока $j_x = e n_S v_x = (e n_S c / B) E$, где $E = E_y$, так что из равенства $E_y = \rho_{yx} j_x$, которым определяется холловское сопротивление $\rho_{yx} = R_H$, находим:

$$R_H = \frac{B}{e n_S c}. \quad (3.180)$$

Как же в рамках этой модели объяснить выделенную роль квантованных значений холловского сопротивления (3.109)? Для такого объяснения следует учесть дискретность энергетического спектра (3.168), отвечающего двумерному движению электрона в квантующем магнитном поле, и *предположить*, что уровень Ферми ε_F находится в щели между какими-либо двумя уровнями Ландау. При таком условии электронный газ полностью заселяет состояния на уровнях Ландау под уровнем Ферми, а уровни Ландау, лежащие выше уровня Ферми, остаются не занятыми (мы рассматриваем предел низких температур, $T \rightarrow 0$). Пусть электроны заполняют i уровней Ландау. Эти электроны движутся вдоль образца со скоростью (3.179), причём концентрация электронов равна

$$n_S = \frac{\eta i}{L_x L_y} = \frac{B e i}{2\pi \hbar c}, \quad (3.181)$$

где η – количество состояний на одном уровне Ландау (см. (3.174); заряд электрона e отрицателен и поэтому $\rho_{yx} < 0$, но в формулах для концентрации электронов (3.181) или холловского сопротивления (3.180), понимаемого как $|\rho_{yx}|$, удобно подразумевать под e положительную величину $|e|$). Подстановка выражения (3.181) в (3.180) даёт как раз требуемую формулу целочисленного квантового эффекта Холла:

$$R_H = \frac{1}{i} \frac{2\pi\hbar}{e^2}, \quad i = 1, 2, 3, \dots \quad (3.182)$$

Предположением о фиксации уровня Ферми в энергетической щели между уровнями Ландау объясняется также факт обращения в нуль продольного сопротивления. В самом деле, продольное сопротивление могло бы отличаться от нуля только за счёт процессов рассеяния. Однако акт рассеяния – это переход электрона из занятого состояния в свободное. Если все состояния уровня Ландау заполнены, то переходы между такими состояниями подавлены принципом запрета Паули. При конечной температуре некоторое количество электронов будет возбуждено из заполненных состояний под уровнем Ферми в свободные состояния следующего уровня Ландау, расположенного по шкале энергии выше на величину $\hbar\omega_c$. Для электронов, заполняющих уровень Ландау лишь частично, рассеяние возможно, но при $T \rightarrow 0$ количество возбуждённых электронов экспоненциально убывает, и поэтому экспоненциально убывает продольное сопротивление.

Рассмотренную картину ЦКЭХ можно назвать «идеальной». В ней предполагается, что ток однородно распределяется по всему образцу, не учитывается ни потенциал примесей, ни взаимодействие электронов с границами образца, ни электрон-электронное взаимодействие. Однако в результате такой идеализации

предположение о том, что электроны должны *полностью* заселять один или несколько уровней Ландау, оказывается не обоснованным, и главное проявление квантового эффекта Холла – наличие *плато на зависимости $R_H(B)$* – остаётся не объяснённым.

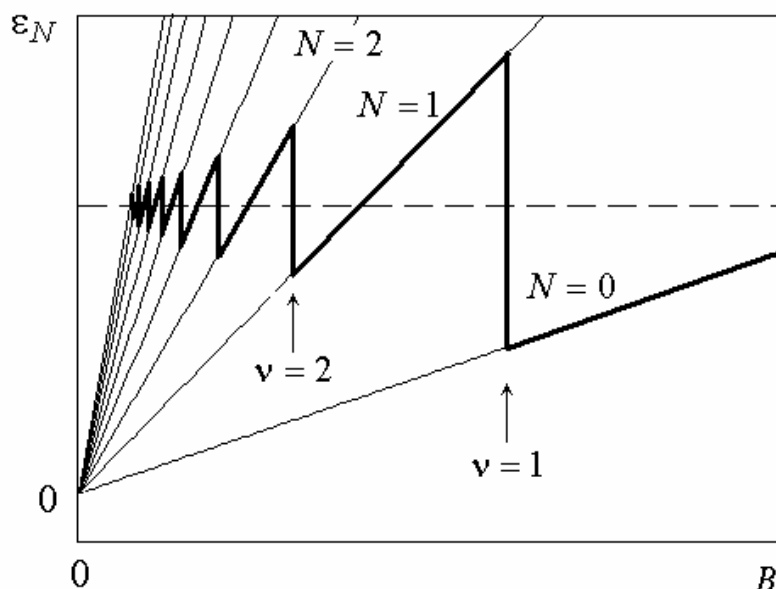


Рис. 3.16. Зависимость уровня Ферми от магнитного поля при $T=0$ в «идеальной» системе с заданной концентрацией электронов n_S . Тонкими прямыми показан ход энергетических уровней Ландау $\varepsilon_N = \hbar \omega_c(N + 1/2)$ при изменении магнитного поля B . Отрезки жирных прямых изображают поведение уровня Ферми. При целочисленных значениях фактора заполнения ν уровень Ферми испытывает скачок. Пунктиром показано то поведение уровня Ферми, которое требуется для возникновения «плато ЦКЭХ»

Ход уровня Ферми при изменении магнитного поля в идеализированной модели с постоянным количеством электронов показан на рис. 3.16. Для пояснения представим себе, что сначала магнитное поле имеет относительно большую величину. Тогда число состояний η на каждом из уровней Ландау велико по сравнению с количеством электронов, и все электроны помещаются в состояниях самого нижнего уровня Ландау ($N = 0$), причём большинство состояний этого уровня ещё остаются не занятыми. Количество

занятых состояний, отнесённое к полному числу состояний на одном уровне Ландау, принято называть *фактором заполнения* (ν):

$$\nu = \frac{n_S L_x L_y}{\eta} = \frac{2\pi\hbar c n_S}{eB}. \quad (3.183)$$

Через эту величину можно выразить классическое холловское сопротивление (3.180):

$$R_H = \frac{1}{\nu} \frac{2\pi\hbar}{e^2}. \quad (3.184)$$

Поскольку уровень Ферми при равной нулю температуре должен разграничивать занятые и свободные состояния, то его положение на шкале энергии в данном случае совпадает с положением уровня Ландау. Теперь будем уменьшать величину магнитного поля B . При этом число состояний η непрерывно уменьшается (а фактор заполнения ν непрерывно возрастает), и до тех пор, пока на уровне Ландау сосуществуют свободные и занятые состояния, уровень Ферми остаётся «привязанным» к уровню Ландау.

Как только фактор заполнения достигнет значения $\nu=1$, электроны с дальнейшим уменьшением магнитного поля начнут заселять состояния вышележащего уровня Ландау ($N=1$). Это означает, что в точке $\nu=1$ уровень Ферми скачком повышается на величину энергетического зазора между соседними уровнями Ландау ($\hbar\omega_c$) и затем остаётся привязанным к уровню Ландау с номером $N=1$. В точке $\nu=2$ происходит следующий скачок уровня Ферми и так далее.

Таким образом, в идеализированной модели уровень Ферми не фиксируется в зазорах между уровнями Ландау, как мы искусственно предположили для первоначального объяснения ЦКЭХ, а наоборот,

совпадает с тем или иным частично заполненным уровнем. В таком случае принципом Паули не запрещено рассеяние, сбивающее центры волновых функций с одного значения y_0 на другое (переходы между состояниями с различными значениями квантового числа k_x в пределах одного и того же уровня Ландау), и продольное сопротивление не обязано быть равным нулю. Не появятся и «плато» на графике $R_H(B)$, так как в этой модели фактор заполнения ν и холловское сопротивление (3.184) изменяются с магнитным полем монотонно.

3.5.9. Роль хаотического потенциала

Оказывается, можно успешно объяснить наблюдаемую на практике картину ЦКЭХ, если учесть, что реальные образцы всегда в какой-то мере несовершенны. Неоднородность гетерограницы, вблизи которой формируется двумерный электронный газ, а также флуктуации концентрации примесей и сам случайный характер расположения примесных ионов – всё это приводит к появлению *хаотического потенциала* $U_{imp}(x, y)$, действующего на электроны в рассматриваемой двумерной системе.

Включение случайного потенциала $U_{imp}(x, y)$ в одноэлектронное уравнение Шредингера (3.162) радикально изменяет энергетический спектр и свойства стационарных состояний электронов. К сожалению, детальный анализ этих изменений – не элементарная задача, и мы вынуждены ограничиться только пояснениями качественного характера. Дело в том, что кристалл с хаотическим потенциалом уже не обладает пространственной симметрией (ни трансляционной, ни поворотной), поэтому аналитически найти точные решения невозможно. Явный вид волновых функций и точная картина энергетических уровней индивидуальны для каждой конкретной реализации хаотического потенциала $U_{imp}(\mathbf{r})$; такие решения могут быть найдены только численными методами. Чтобы теоретически

выявить основные черты точных решений, целесообразно ограничить анализ предельными случаями (например, такими как «плавный» и «резкий» хаотический потенциал), но и тогда теория оказывается сложной. Ниже мы без вывода сформулируем два основных результата многочисленных исследований задач со случайным потенциалом, актуальных для объяснения КЭХ.

Первое, что играет важную роль, – это *размытие* уровней Ландау в относительно широкие энергетические полосы. Пояснить причину размытия проще всего в случае плавного хаотического потенциала. Потенциал $U_{imp}(\mathbf{r})$ считается плавным, если характерная длина l_U , на которой становятся заметными изменения значений U_{imp} от точки к точке, существенно превышает магнитную длину: $l_U \gg l_B$. В этом случае можно считать, что энергия электрона на циклотронной орбите зависит от положения центра орбиты, поскольку она отсчитывается от дна энергетической подзоны, плавно искривлённого в соответствии с рельефом $U_{imp}(\mathbf{r})$. Другими словами, при наличии плавного потенциального рельефа уровни Ландау образуют отдельную «лестницу» в окрестности каждой точки \mathbf{r} , так что в целом на шкале энергии вместо узких уровней Ландау возникают широкие энергетические полосы разрешённых состояний. В случае резкого потенциала это пояснение теряет смысл, но вывод о наличии размытия остаётся в силе. Во всех случаях распределение разрешённых состояний на шкале энергии ε характеризуется плотностью состояний $g(\varepsilon)$, показанной на рис. 3.17. Уровням Ландау в идеальной системе соответствуют предельно резкие пики плотности состояний в виде дельта-функций $\eta \delta(\varepsilon - \varepsilon_N)$, тогда как в реальной системе с хаотическим потенциалом эти пики приобретают конечную ширину. В результате, уровень Ферми в реальной системе при изменении фактора заполнения не испытывает скачков, а постепенно перемещается относительно максимумов плотности состояний.

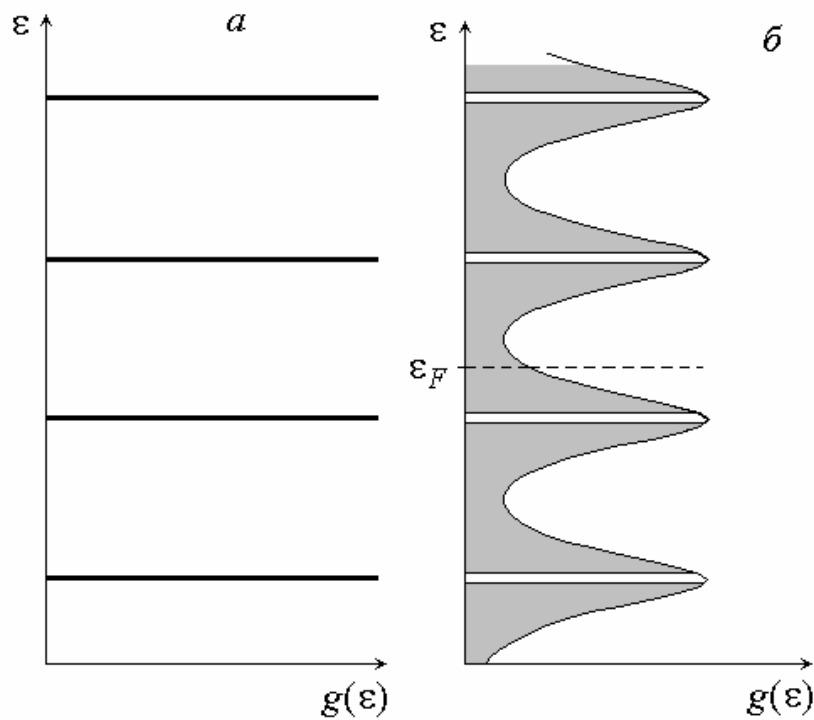


Рис. 3.17. Плотность одноэлектронных состояний $g(\epsilon)$ двумерной системы в квантующем магнитном поле.

a – узкие пики плотности состояний идеализированной 2D-системы в поперечном магнитном поле. Каждый пик соответствует уровню Ландау. Расстояние между соседними пиками на шкале энергии составляет $\hbar\omega_c$. *б* – уширенные уровни Ландау. Серым цветом показаны локализованные состояния. Белая полоска в центре каждого уширенного уровня изображает делокализованные состояния

Второе важное обстоятельство – наличие в хаотическом потенциале *локализованных состояний*, не способных нести электрический ток.

Представление о локализации имеет давнюю историю. Началом послужила работа Ф. Андерсона 1958 года, которая привела к понятию «переход Андерсона», описывающему смену металлического (проводящего) состояния неупорядоченной системы на диэлектрическое состояние с ростом степени неупорядоченности.

Хорошо известный пример такого перехода встречается при изучении примесных состояний в запрещённой зоне полупроводника. При увеличении концентрации примесных атомов вместо одиночного

энергетического уровня образуется примесная зона, ширина которой W увеличивается по мере увеличения перекрытия волновых функций примесных центров. Неупорядоченность положения примесей в кристаллической решётке в какой-то мере эквивалентна флуктуациям потенциала; пусть U – характерная величина таких флуктуаций. Тогда, как показывают теория и эксперимент, при больших значениях безразмерного параметра U/W все состояния в примесной зоне 3D-системы оказываются локализованными, так что подвижность, а с ней и проводимость электронов в примесной зоне в пределе низких температур ($T \rightarrow 0$) обращаются в ноль. Огибающая волновой функции ψ локализованного состояния убывает с увеличением расстояния r от центра локализации по закону $\psi \propto \exp(-r/\xi)$, где $\xi(\varepsilon)$ – характерная длина локализации. Причиной локализации является квантовая интерференция «волн де Бройля», отражающихся от «холмов» хаотического потенциального рельефа.

С уменьшением параметра U/W ниже определённого критического значения в середине примесной зоны появляется полоса делокализованных состояний – с энергией ε в некотором интервале $\varepsilon_c < \varepsilon < \varepsilon'_c$, где ε'_c и ε_c – верхний и нижний *пороги подвижности*, отделяющие полосу делокализованных состояний от локализованных состояний на краях примесной зоны. Вблизи порога подвижности, при $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_c$, длина локализации $\xi(\varepsilon)$ неограниченно возрастает. Волновая функция делокализованного состояния распространяется по всему объёму образца – она не имеет экспоненциальной огибающей.

На рубеже 1970–80-х годов были выполнены работы по изучению квантовых поправок к проводимости металлов в системах различной размерности – тема, тесно связанная с андерсоновской локализацией. Выяснилось, что без магнитного поля в одномерных и двумерных системах электронные состояния локализованы даже при сколь угодно малой неупорядоченности (в отличие от трёхмерных систем, где все состояния становятся локализованными только в достаточно большом хаотическом потенциале). На первый взгляд,

этот вывод противоречит наблюдению КЭХ, где постоянный ток при $T \rightarrow 0$ течёт, очевидно, по делокализованным состояниям. Оказывается, однако, что магнитное поле существенно меняет картину квантовой интерференции и может частично расстроить локализацию электронов в двумерной системе. Расчёты в рамках квантовой теории локализации показали, что в центре размытого уровня Ландау, то есть на уровне энергии ε_N , обязательно должны присутствовать делокализованные состояния, поскольку длина локализации $\xi(\varepsilon)$ неограниченно возрастает при $\varepsilon \rightarrow \varepsilon_N$ (по степенному закону с показателем степени, приблизительно равным $-7/3$):

$$\xi(\varepsilon) \propto |\varepsilon - \varepsilon_N|^{-7/3}.$$

В случае плавного хаотического потенциала мы можем воспользоваться наглядным представлением о дрейфе циклотронных орбит и также придти к картине локализованных и делокализованных состояний. Хаотический потенциал даёт вклад в локальное электрическое поле $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -(1/e)\nabla(U_{imp}(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}))$, направленное по локальным нормальям к эквипотенциальным линиям. Поскольку циклотронная орбита дрейфует со скоростью v_E , перпендикулярной электрическому полю, мы заключаем, что *центр орбиты движется по эквипотенциальному контуру* суммарного электростатического потенциала, содержащего хаотическую составляющую.

Контур, проходящие «у подножия» рельефа случайного потенциала, оказываются запертыми в долинах рельефа; это аналог квантовых локализованных состояний у нижнего края уширенного уровня Ландау. Контур, лежащие близко к вершинам холмов потенциального рельефа, замыкаются вокруг этих холмов; они, следовательно, тоже соответствуют локализованным состояниям — аналогия для локализованных состояний у верхнего края

энергетической зоны. Понятно, что по мере подъёма от долин к холмам мы должны встретить и такой контур, который проходит, извиваясь, по всему образцу (он расположен на уровне «протекания», см. рис. 3.18). Этот контур соответствует делокализованному состоянию в центре уширенного уровня Ландау.

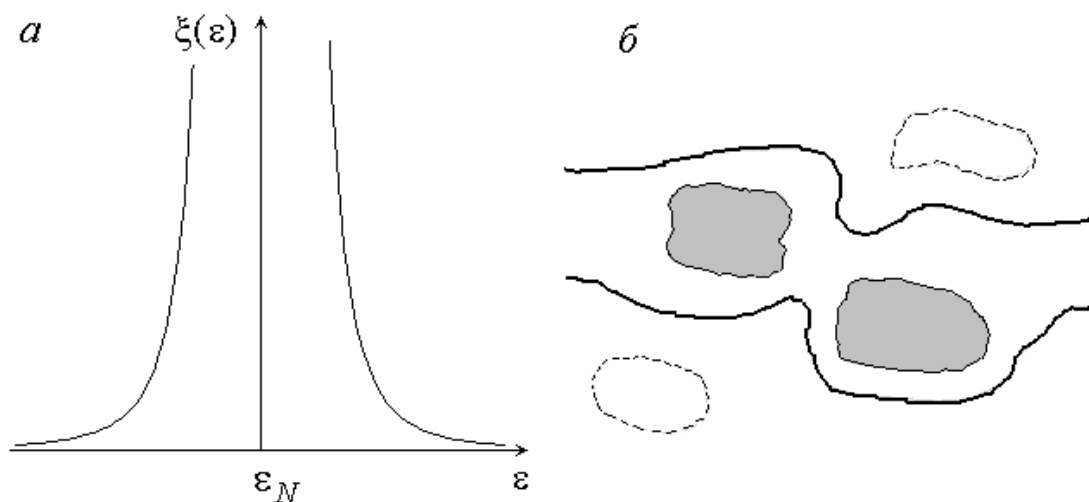


Рис. 3.18. К вопросу о локализованных состояниях.

a – зависимость длины локализации $\xi(\varepsilon)$ от энергии вблизи центра уширенного уровня Ландау $\varepsilon_N = \hbar\omega_c(N + 1/2)$. Неограниченный рост длины локализации равноценен появлению делокализованных состояний. *б* – эквипотенциальные контуры хаотического потенциального рельефа. Штриховые контуры окружают области с высоким значением потенциала. Тонкие сплошные контуры окружают «впадины» потенциального рельефа, то есть области с низким значением потенциала, изображённые серым цветом. Жирные линии соответствуют уровню протекания

Таким образом, каждый уширенный уровень Ландау 2D-системы похож на примесную зону с делокализованными состояниями в центре и с локализованными состояниями по краям. Интервал энергии между делокализованными состояниями соседних уровней Ландау называют *щелью подвижности*. В отличие от энергетической щели между резкими уровнями Ландау (в идеальной 2D-системе), где нет никаких разрешённых состояний, щель

подвижности содержит разрешённые состояния, но все они являются локализованными и не могут дать вклада в проводимость при $T \rightarrow 0$.

Эта картина уже позволяет объяснить появление плато ЦКЭХ. Электроны заселяют разрешённые состояния – как делокализованные, так и локализованные – вплоть до уровня Ферми, который в общем случае оказывается в щели подвижности. Если под уровнем Ферми находятся i уровней Ландау, то принадлежащие им делокализованные состояния полностью заняты электронами; эти электроны дрейфуют вдоль образца и дают вклад в ток I , соответствующий холловскому напряжению V_y . Рассеяние под уровнем Ферми подавлено принципом Паули, так что продольное напряжение V_x при $T \rightarrow 0$ равно нулю. С уменьшением магнитного поля уровень Ферми монотонно смещается в область вышележащих состояний. Но пока уровень Ферми остаётся в щели подвижности, число i не изменяется; поэтому не изменяется и холловское напряжение – имеет место плато.

Другими словами, локализованные состояния в щели подвижности выступают в роли резервуара, который принимает или отдаёт электроны, препятствуя скачкам уровня Ферми между центрами уровней Ландау, а эффект Холла обеспечивают делокализованные электроны под уровнем Ферми. Переход между соседними плато возникает тогда, когда уровень Ферми в процессе перехода из одной щели подвижности в следующую попадает в область делокализованных состояний в центре уровня Ландау.

Указанное объяснение плато, однако, приводит к новому вопросу: если вклад в ток дают лишь делокализованные состояния, то почему величина холловского сопротивления в области плато совпадает (притом очень точно) с квантованными значениями (3.182), как если бы ток I создавали все η состояний каждого заполненного уровня Ландау?

3.5.10. Краевые состояния

Ответ на сформулированный выше простой вопрос оказывается не очевидным. Суть ответа сводится к утверждению, что хаотический потенциал изменяет скорость движения электронов, и притом так, что в области плато суммарный ток I делокализованных электронов, сколько бы их ни было на i уровнях Ландау под уровнем Ферми, удовлетворяет формуле ЦКЭХ: $I = i(e^2 / h) V_y$. Эта ситуация проиллюстрирована на рис. 3.19.

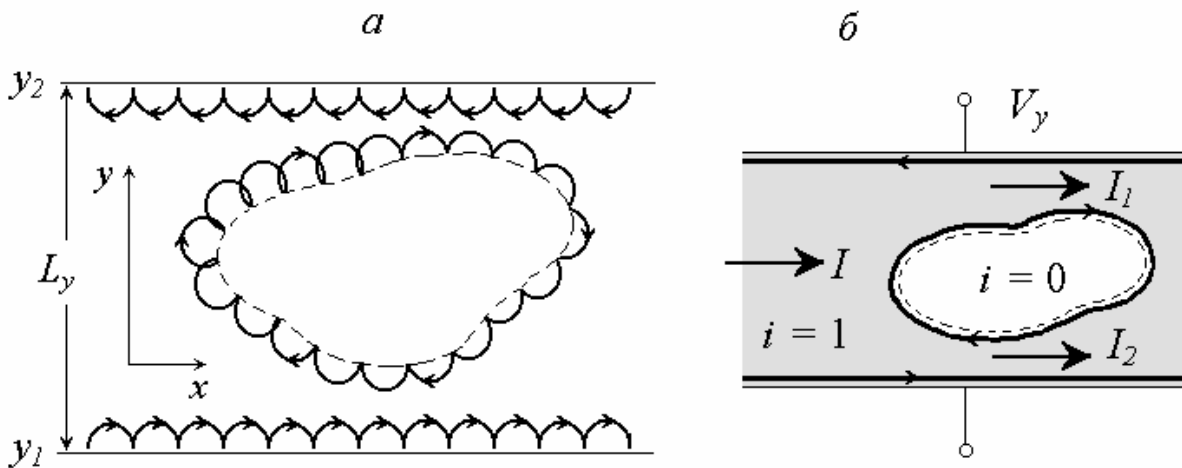


Рис. 3.19. Неоднородное распределение тока в холловском мостике. *а* – квазиклассическая картина краевых и вихревых токов в образце конечной ширины L_y с плавным хаотическим потенциалом. Для удобства здесь считается, что носители – положительно заряженные частицы. Краевые и вихревые токи создаются носителями на «скачущих» орбитах. *б* – схематическое изображение холловского мостика при условии, что фактор заполнения ν немного меньше единицы. В области холма хаотического потенциала (граница этой области показана пунктиром) состояния уровня Ландау лежат выше уровня Ферми и поэтому не заполнены носителями ($i = 0$). В остальной части образца (она показана серым цветом) уровень Ландау заполнен носителями ($i = 1$), так как этот уровень Ландау находится под уровнем Ферми. Краевые и вихревые токи здесь изображены жирными линиями

Пунктиром на рис. 3.19 показан контур, окружающий «холм» потенциального рельефа. Циклотронные орбиты дрейфуют в

локальном электрическом поле этого холма, создавая тем самым вихревой ток (замкнутый вокруг холма). Вдоль верхнего ($y = y_2$) и нижнего ($y = y_1$) края образца текут краевые токи, обусловленные «скачущими» орбитами носителей заряда – такие орбиты образуются вследствие отражения циклотронных орбит носителей от границ образца. На рис. 3.19, б краевые и вихревые токи изображены более схематично, жирными прямыми линиями. Этот рисунок помогает понять, что внутри реального образца плотность тока и скорость носителей заряда распределены неоднородно. При этом ни вихревой ток, ни два краевых тока, если они оба равны по величине и противоположны по направлению, не дают вклада в полный ток I , поступающий в образец из внешней цепи.

Пусть при заданной величине магнитного поля под уровнем Ферми может располагаться только один уровень Ландау. В присутствии плавного хаотического потенциала $U_{imp}(x, y)$ положение этого уровня меняется вместе с высотой потенциального рельефа. Следовательно, в области холма уровень Ландау оказывается опустошённым; другими словами, в этой области число заполненных уровней Ландау равно нулю: $i = 0$. Однако, вдали от холма $i = 1$. Это означает, что в данном случае фактор заполнения в среднем меньше единицы: $\nu < 1$. Представим себе, что вдали от холма образец идеален. Поскольку в идеальной области выполнены условия (3.181) – (3.182), то холловское напряжение будет описываться формулой ЦКЭХ (в данном примере с $i = 1$):

$$V_y = R_K I, \quad \text{где} \quad R_K = \frac{2\pi\hbar}{e^2}. \quad (3.185)$$

В той части образца, где есть холм, холловское напряжение V_y равно сумме холловских напряжений на верхней части образца (с током I_1) и на нижней его части (с током I_2). Это должно быть ясно из рис. 3.19, б с учётом того факта, что жирные линии, изображающие

движение центров циклотронных орбит, являются эквипотенциальными контурами. Таким образом, наличие участков с другим значением фактора заполнения (в данном примере это белая область на рис. 3.19, б, то есть область с локальным фактором заполнения $i = 0$) не влияет на величину холловского напряжения:

$$V_y = R_K I_1 + R_K I_2 = R_K I.$$

Для простоты мы ограничились только одним примером, но из него видно, что исключение части электронных состояний из процесса переноса заряда не влияет на величину измеряемого холловского напряжения, как не влияют и детали неоднородного распределения тока внутри образца. Естественно, подобная универсальность квантованных значений холловского сопротивления должна следовать из самых общих принципов квантовой физики. Работы целого ряда физиков-теоретиков показали, что квантование холловского сопротивления (или проводимости) действительно может быть выведено из фундаментальных представлений — о калибровочной инвариантности в квантовой теории или о топологических инвариантах. Указанные представления, однако, лишены наглядности, и мы не будем пытаться здесь в них вникнуть. Вместо этого рассмотрим ещё одну трактовку ЦКЭХ, выявляющую универсальный характер закона фон Клитцинга (3.185).

Оказывается, можно придти к выводу о квантовании холловского сопротивления, рассматривая только краевые токи, текущие вдоль образца конечной ширины. Выше мы выявили присутствие краевых токов с помощью классической картины скачущих орбит. В рамках квантовых представлений существование краевых состояний с энергией, равной уровню химпотенциала на одном и другом крае образца, иллюстрируется рис. 3.20; для простоты на нем не отражен тот факт, что при наличии поперечной разности потенциалов V_y уровни химпотенциала на краях образца различаются.

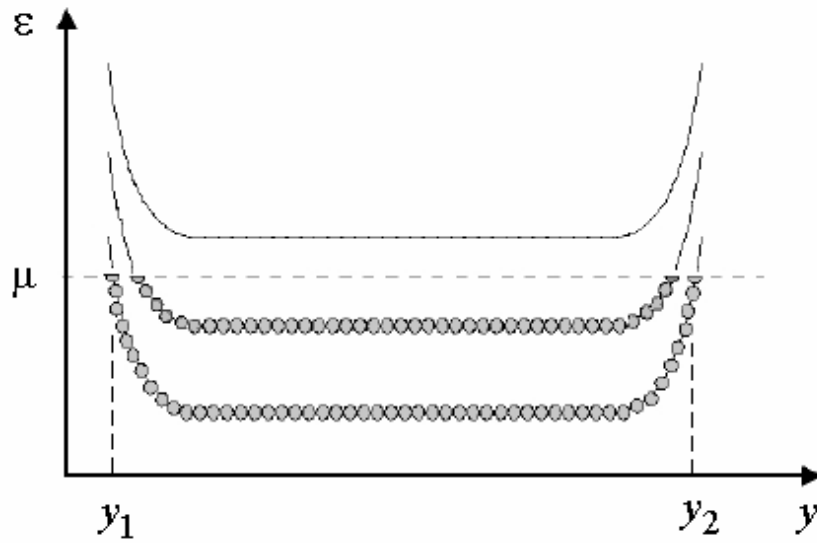


Рис. 3.20. Образование краевых состояний (схематично).

Изображен случай, при котором количество уровней Ландау под уровнем Ферми составляет $i = 2$; считаем, что температура $T = 0$. Края образца можно рассматривать как стенки потенциальной ямы, удерживающей электроны внутри кристалла. Вблизи этих стенок уровни Ландау изгибаются вверх и пересекаются с уровнем Ферми μ , образуя «каналы», простирающиеся в направлении оси x , то есть – перпендикулярно плоскости рисунка. Вблизи каждого края образца присутствуют i каналов с электрическим током (краевые токи)

Пусть в средней части образца под уровнем Ферми находятся i уровней Ландау (на рис. 3.20 показан случай с $i = 2$) – с номерами $N = 0, \dots, i - 1$. Ток I , протекающий вдоль образца, равен сумме вкладов I_N от электронов на этих уровнях Ландау:

$$I = \sum_{N=0}^{i-1} I_N. \quad (3.186)$$

Вклад в ток от одного (N -го) уровня Ландау можно записать в виде суммы вкладов от заполненных состояний на этом уровне:

$$I_N = e \int_{k_{\min}}^{k_{\max}} \frac{dk_x}{2\pi} v_x, \quad (3.187)$$

где

$$v_x = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_{N, k_x}}{\partial k_x}. \quad (3.188)$$

Здесь квантовое число k_x нумерует состояния, принадлежащие N -ому уровню Ландау, которые различаются положением центра y_0 волновой функции на оси y (в классических терминах – центра циклотронной орбиты). Поэтому производную (3.188) от энергии циклотронной орбиты по k_x можно интерпретировать как производную по координате y , а пределы интегрирования в (3.187) соответствуют краям образца y_1 и y_2 . В этой интерпретации мы допускаем наличие случайного потенциального рельефа и не предполагаем выполнения соотношений идеализированной модели, таких как (3.165) – (3.166).

Если в средней части образца положение уровня Ландау не зависит от y (см. рис. 3.20), то скорость (3.188) обращается в ноль, и эта область образца не даёт вклада в ток. Из рис. 3.20 понятно, что на краях образца положение уровня Ландау существенно зависит от y , поэтому скорость (3.188) там не равна нулю, так что с этой точки зрения именно краевые токи дают основной вклад в интеграл (3.187). Осталось заметить, что с учетом формулы (3.188) выражение под знаком интеграла (3.187) представляет собой полную производную от энергии уровня Ландау, поэтому интеграл равен разности значений уровня Ландау на краях образца, а эта разность, как видно из рис. 3.20, равна разности значений химпотенциала $\mu(y_2) - \mu(y_1) = eV_y$:

$$\begin{aligned} I_N &= e \int_{k_{\min}}^{k_{\max}} \frac{dk_x}{2\pi} \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_{N, k_x}}{\partial k_x} = \frac{e}{2\pi\hbar} \left(\varepsilon_{N, k_x} \Big|_{y_2} - \varepsilon_{N, k_x} \Big|_{y_1} \right) = \\ &= \frac{e}{2\pi\hbar} (\mu(y_2) - \mu(y_1)) = \frac{e^2}{2\pi\hbar} V_y. \end{aligned} \quad (3.189)$$

Подставив (3.189) в (3.186), получаем результат, в точности соответствующий ЦКЭХ:

$$I = \frac{ie^2}{2\pi\hbar} V_y. \quad (3.190)$$

Таким образом, можно считать, что основные черты явлений, лежащих в основе целочисленного квантового эффекта Холла, выяснены.

3.5.11. Дробный квантовый эффект Холла

Дробный квантовый эффект Холла (ДКЭХ) имеет значительно более сложное объяснение, чем ЦКЭХ, и мы ограничимся только кратким комментарием. В основе теоретического исследования ДКЭХ лежит изучение *многочастичной* волновой функции двумерного электронного газа, учитывающей взаимодействие электронов друг с другом в присутствии сильного магнитного поля, при низких температурах и в условиях слабого беспорядка – когда *хаотический потенциал мал* в сравнении с энергией электрон-электронного взаимодействия.

Впервые количественное описание квантовых состояний такой системы было получено Р. Лафлином, применившим вариационный метод. Этим методом удалось найти выражение для волновой функции основного состояния системы, состоящей из нескольких электронов, и для возбужденных состояний, ближайших к основному. Изучение возбужденных состояний показало, что они могут быть интерпретированы как квазичастицы с дробным электрическим зарядом, а переходы между плато с различными значениями фактора заполнения в рамках многоэлектронного описания имеют черты квантовых фазовых переходов.

4. ОПТИЧЕСКИЕ ЯВЛЕНИЯ В КВАНТОВОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУРАХ

4.1. ОСНОВНЫЕ МЕХАНИЗМЫ ПОГЛОЩЕНИЯ СВЕТА В КВАНТОВЫХ ЯМАХ

В простейшей модели спектр разрешенных состояний носителей заряда в объемном полупроводнике ограничивается двумя зонами – зоной проводимости и валентной зоной. В такой модели оптические свойства полупроводника будут обусловлены всего двумя типами переходов носителей заряда под действием поля световой волны – внутризонными и межзонными переходами.

Перейдем теперь к случаю квантово-размерных структур (КРС). Размерное квантование в полупроводниковых структурах с пониженной размерностью (квантовых ямах, квантовых нитях и квантовых точках) приводит к качественному изменению спектра разрешенных состояний. Остановимся для определенности на случае двумерного электронного газа, который существует в квантовых ямах. Спектр энергии электрона в квантовой яме, изображенный на рис. 4.1, существенно богаче спектра энергии трехмерного движения. Очевидно, что наличие подзон размерного квантования в зоне проводимости и валентной зоне значительно увеличивает количество вариантов оптических электронных переходов. Мы можем выделить следующие типы таких переходов, которые могут происходить в энергетическом спектре, изображенном на рис. 4.1:

- 1 – межзонные переходы;
- 2 – межподзонные переходы;
- 3 – переходы в сплошной спектр состояний (фотоионизация квантовой ямы);
- 4 – внутривидподзонные переходы.

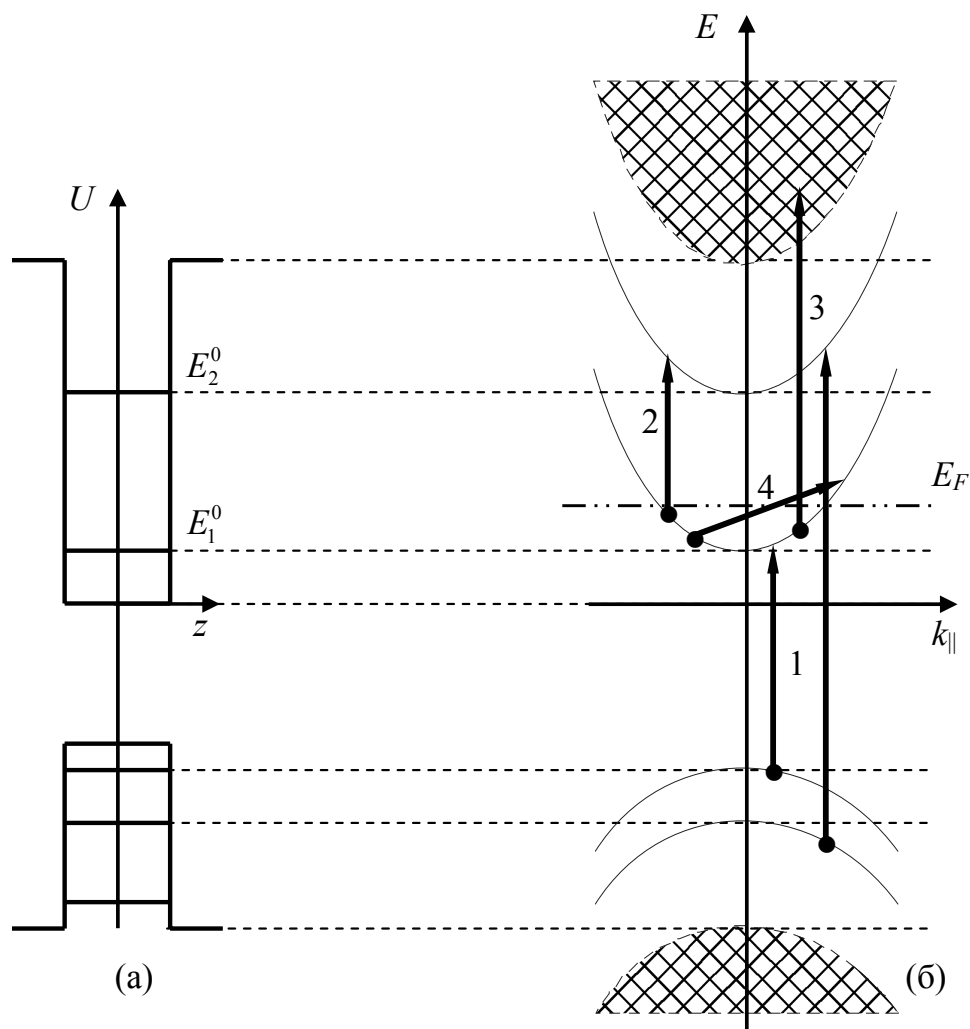


Рис. 4.1. Оптические переходы электронов в наноструктуре с квантовой ямой.

a – прямоугольная квантовая яма конечной глубины: профиль потенциала и уровни размерного квантования; *b* – энергетический спектр и возможные оптические переходы электронов

Основные оптические явления в наноструктурах рассмотрены в книге [5]; в частности, в ней подробно обсуждаются упомянутые выше механизмы поглощения света в квантовых ямах. В настоящем разделе будут описаны особенности некоторых оптических явлений, которые не вошли в [5], а также некоторые приборы, действие которых основано на оптических переходах в наноструктурах.

4.2. ЭКСИТОННОЕ ПОГЛОЩЕНИЕ СВЕТА

Как и в объемных полупроводниках, в системах с пониженной размерностью эффекты кулоновского взаимодействия электрона и дырки (экситонные эффекты) существенно влияют на поглощение света с энергией кванта, близкой к ширине запрещенной зоны. Особенностью низкоразмерных систем является даже более сильное проявление экситонных эффектов по сравнению с объемными полупроводниками. В настоящем разделе будет рассмотрено образование экситонов в квантовых ямах, спектр энергии экситонов, экситонное поглощение света и влияние на него сильного электрического поля.

4.2.1. Экситоны в квантовых ямах

При изучении межзонного поглощения света в квантовых ямах возникают ситуации, когда, как и в объемных полупроводниках, необходимо учитывать кулоновское взаимодействие электрона и дырки с координатами \mathbf{r}_e и \mathbf{r}_h , возникающих при поглощении кванта света с энергией, близкой к ширине запрещенной зоны. Учесть это взаимодействие можно, например, в методе эффективной массы, записав уравнение Шредингера для двухчастичной волновой функции $\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h)$:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta_{\mathbf{r}_e}\Psi - \frac{\hbar^2}{2m_h}\Delta_{\mathbf{r}_h}\Psi - \frac{e^2}{\varepsilon\sqrt{(x_e - x_h)^2 + (y_e - y_h)^2 + (z_e - z_h)^2}}\Psi = (E - E_g)\Psi, \quad (4.1)$$

где $\Delta_{\mathbf{r}_e}$ и $\Delta_{\mathbf{r}_h}$ – операторы Лапласа по координатам \mathbf{r}_e и \mathbf{r}_h .

Для простоты считаем квантовую яму бесконечно глубокой; в связи с этим ограничивающий потенциал в (4.1) отсутствует, а граничные условия соответствуют обращению волновой функции на стенках ямы в ноль. Ось z , как всегда, параллельна нормали к плоскости структуры; это направление часто называют «осью роста» структуры.

Даже для бесконечно глубокой квантовой ямы решить уравнение (4.1) аналитически не удастся. В связи с этим еще более упростим задачу, считая квантовую яму достаточно узкой:

$$L \ll a_B, \quad (4.2)$$

где a_B – боровский радиус для частицы с приведенной массой m_{eh} ($m_{eh}^{-1} = m_e^{-1} + m_h^{-1}$):

$$a_B = \frac{\varepsilon \hbar^2}{m_{eh} e^2} = \frac{\varepsilon}{m_{eh}/m_0} 0,528 \text{ \AA}. \quad (4.3)$$

В этом случае можно пренебречь разностью $|z_e - z_h| \sim L$ в уравнении (4.1) по сравнению с $|x_e - x_h|$, $|x_e - x_h| \sim a_B$. Такое упрощение позволит разделить движение частиц вдоль оси z и в плоскости (x, y) , полагая, что первое определяется пространственным ограничением, а второе – кулоновским взаимодействием электрона и дырки.

Отметим, что условие (4.2) эквивалентно следующему:

$$E_{\text{разм}} \sim \frac{\hbar^2}{m_{eh} L^2} \gg \frac{\hbar^2}{m_{eh} a_B^2} \sim R_{ex}, \quad \text{то есть} \quad E_{\text{разм}} \gg R_{ex}, \quad (4.4)$$

где $E_{\text{разм}}$ – сумма энергий размерного квантования электрона и дырки, а R_{ex} – энергия связи объемного экситона. Таким образом, мы считаем кулоновское взаимодействие слабым возмущением по сравнению с размерным квантованием.

Теперь удобно от \mathbf{r}_e , и \mathbf{r}_h в (4.1) перейти к двумерным переменным $\boldsymbol{\rho}$ и \mathbf{R} , описывающим, соответственно, относительное движение электрона и дырки и движение их центра масс в плоскости (x, y) , оставив z_e и z_h для описания поперечного движения:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\rho} &= (x_e - x_h, y_e - y_h), \\ \mathbf{R} &= \left(\frac{m_e x_e + m_h x_h}{m_e + m_h}, \frac{m_e y_e + m_h y_h}{m_e + m_h} \right). \end{aligned} \quad (4.5)$$

В результате, гамильтониан будет представлен суммой членов, зависящих только от $\boldsymbol{\rho}$, \mathbf{R} , z_e или z_h , что позволяет разделить движение частиц в плоскости (x, y) и движение в поперечном направлении. Вид уравнения (4.1) после подстановки в него (4.5) позволяет записать волновую функцию следующим образом:

$$\Psi(\mathbf{r}_e, \mathbf{r}_h) = \chi_e(z_e) \cdot \chi_h(z_h) \cdot \exp(i\mathbf{K}_{\parallel} \mathbf{R}) \cdot \varphi(\boldsymbol{\rho}), \quad (4.6)$$

где $\chi_e(z_e)$ и $\chi_h(z_h)$ – волновые функции одномерного движения электрона и дырки в ограничивающем потенциале квантовой ямы, $\exp(i\mathbf{K}_{\parallel} \mathbf{R})$ – волновая функция движения центра масс электрона и дырки, а волновая функция «внутреннего» движения экситона $\varphi(\boldsymbol{\rho})$ находится из уравнения для движения в двумерном кулоновском потенциале:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{eh}} \Delta_{\boldsymbol{\rho}} \varphi - \frac{e^2}{\varepsilon \rho} \varphi = E_{ex} \varphi. \quad (4.7)$$

Это уравнение имеет аналитическое решение; в частности, уровни энергии описываются следующим выражением (см. раздел 2.1):

$$E_{ex} = -\frac{m_{eh}e^4}{2\varepsilon^2\hbar^2(l-1/2)^2} = -\frac{R_{ex}}{(l-1/2)^2}, \quad l=1, 2, \dots \quad (4.8)$$

Полная энергия экситона, соответствующая волновой функции (4.6), складывается из энергий размерного квантования электронов и дырок, энергии движения экситона в плоскости квантовой ямы как целого и энергии внутреннего двумерного движения экситона:

$$E = E_g + E_e^n + E_h^n + \frac{\hbar^2 K_{\parallel}^2}{2(m_e + m_h)} - \frac{m_{eh}e^4}{2\varepsilon^2\hbar^2(l-1/2)^2}, \quad (4.9)$$

где $l=1, 2, 3, \dots$, а E_e^n и E_h^n – энергии размерного квантования электронов и дырок в n -ой подзоне.

Если пренебречь волновым вектором экситона \mathbf{K}_{\parallel} , то спектр энергий экситона представляет собой серии экситонных уровней с различным внутренним квантовым числом l , «подвешенных» к уровням энергий размерного квантования $E_g + E_e^n + E_h^n$ с различным n . Такое разделение уровней размерного квантования и уровней внутреннего движения экситона возможно в случае узкой ямы, описываемом условием (4.2).

Из (4.8) следует, что энергия связи экситона в бесконечно глубокой узкой квантовой яме, соответствующая энергии основного уровня экситона ($l=1$), в 4 раза превышает энергию связи объемного экситона:

$$R_{ex}^{KY} = \left| E_{ex} \right|_{l=1} = 4R_{ex}. \quad (4.10)$$

Этот факт существенно облегчает наблюдение экситонных эффектов в квантовых ямах. Например, становится возможным обнаружить их при комнатных температурах, что невозможно в объемных полупроводниках. Увеличение энергии связи экситона в квантовой яме связано с действием ограничивающего потенциала ямы, который дополнительно к кулоновскому потенциалу локализует электрон и дырку в направлении оси z . Это дополнительное притяжение электрона и дырки повышает устойчивость экситона, то есть увеличивает его энергию связи; аналогичная ситуация имеет место в задаче о кулоновском примесном центре – см. раздел 2.1.

На рис. 4.2 приведен пример спектра поглощения света в сверхрешетке, измеренного при комнатной температуре. Отчетливо видны пики экситонного поглощения, связанные с квантовыми числами $n = 1, 2$ и 3 . Разрешаются также переходы, связанные с тяжелыми и легкими дырками при $l = 1$. Отметим, что в объемном арсениде галлия экситонные переходы практически не проявляются в спектрах поглощения при комнатной температуре.

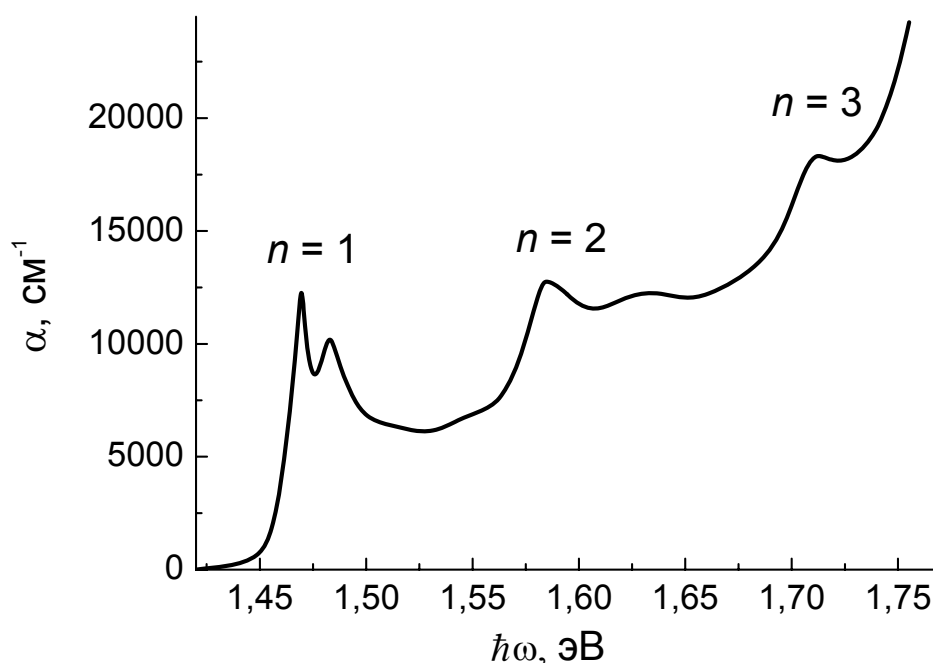


Рис. 4.2. Спектр поглощения света в сверхрешетке GaAs / Al_{0,3}Ga_{0,7}As (96 Å / 98 Å) при комнатной температуре; рис. из книги [11]

В реальных структурах условие (4.10) строго уже не выполняется. В квантовой яме, ширина которой превышает размер экситона, относительное движение электрона и дырки во всех направлениях подвержено действию кулоновского потенциала. Даже в бесконечно глубокой яме конечной ширины необходимо численно решать уравнение (4.1). Рассчитанные значения энергии связи экситона в зависимости от ширины ямы приведены на рис. 4.3.

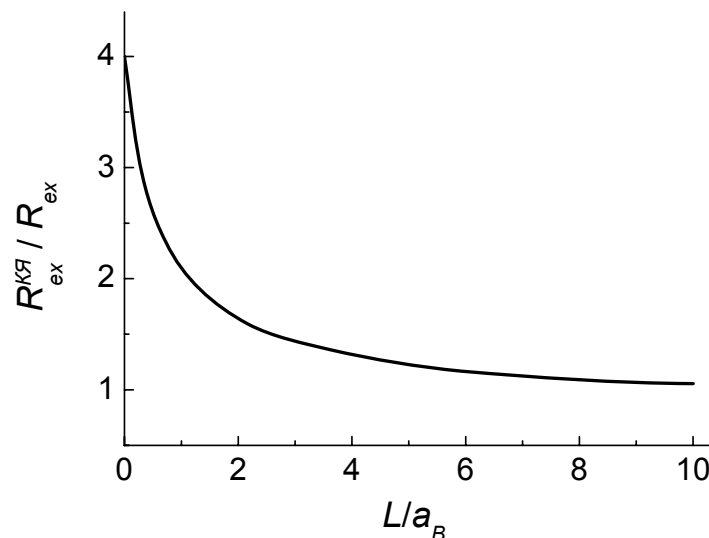


Рис. 4.3. Зависимость энергии связи экситона в бесконечно глубокой квантовой яме от ее ширины, рассчитанная численным методом; рис. из книги [12]

Если ширина ямы значительно превышает боровский радиус, энергия связи экситона стремится к своему значению в объемном материале; в предельно же узкой яме выполняется условие (4.10). Если ширина ямы равна боровскому радиусу экситона, энергия связи двукратно превышает объемное значение. Характерный размер a_B для GaAs легко оценить по формуле (4.3): $a_B \approx 90 \text{ \AA}$.

Даже уменьшая ширину квантовой ямы до значений $L \ll a_B$, в реальной структуре достичь предела (4.10) не удастся. Это связано с конечностью высоты барьера. С уменьшением ширины ямы уровень размерного квантования выталкивается к потолку ямы, что приводит

к уменьшению локализации волновой функции вдоль оси z из-за увеличения вероятности туннелирования под барьер. В результате, с уменьшением ширины квантовой ямы размер волновой функции вдоль оси z (область, которую занимает электрон) сначала уменьшается вслед за шириной ямы, а затем начинает увеличиваться, и в пределе бесконечно тонкой ямы мы снова оказываемся в ситуации объемного полупроводника, которым в данном случае является материал барьера. На рис. 4.4 приведены результаты расчета энергии связи экситона в квантовой яме конечной глубины, отражающие это явление.

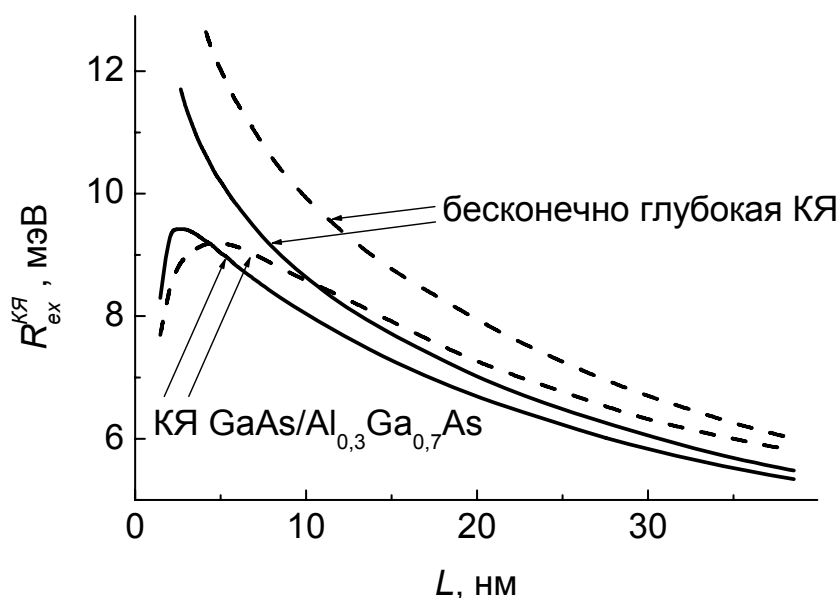


Рис. 4.4. Энергии связи основного состояния экситонов, образованных легкими (штриховые линии) и тяжелыми (сплошные линии) дырками, в квантовой яме GaAs / Al_{0,3}Ga_{0,7}As в зависимости от ее ширины. Для сравнения приведены результаты расчета для бесконечно глубокой ямы. Данные из работы R.L.Greene et al / Phys. Rev. B. – 1984. – Vol. 29. – P. 1807–1812

Зависимости, приведенные на рис. 4.4, учитывают возможность участия в образовании экситона двух типов дырок – легких и

тяжелых. Энергии связи таких экситонов отличаются из-за различия эффективных масс дырок.

Отметим некоторые интересные особенности, возникающие при учете двух типов экситонов. Утверждение, что масса легких дырок меньше массы тяжелых дырок полностью справедливо лишь для объемного полупроводника. Размерное квантование приводит к тому, что закон дисперсии дырок резко усложняется, причем эффективная масса дырок становится анизотропной по отношению к нормали слоистой наноструктуры (ось z). Объемное соотношение между массами тяжелых и легких дырок приблизительно выдерживается только для поперечных эффективных масс (для движения вдоль z), тогда как продольная эффективная масса (для движения в плоскости структуры) легких дырок превышает продольную массу тяжелых дырок. В некотором приближении можно считать, что продольные и поперечные эффективные массы тяжелых и легких дырок следующим образом выражаются через параметры Латтинжера $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ и массу свободного электрона m_0 [6]:

$$m_{hh}^{\perp} = \frac{m_0}{\gamma_1 - 2\gamma_2}, \quad m_{lh}^{\perp} = \frac{m_0}{\gamma_1 + 2\gamma_2}, \quad (4.11)$$

$$m_{hh}^{\parallel} = \frac{m_0}{\gamma_1 + \gamma_2}, \quad m_{lh}^{\parallel} = \frac{m_0}{\gamma_1 - \gamma_2}.$$

Поскольку для продольного движения масса легких дырок больше массы тяжелых дырок, в бесконечно глубокой яме энергия связи легких дырок превышает энергию связи тяжелых дырок. В яме конечной глубины может проявляться различная степень локализации легких и тяжелых дырок, связанная с их различными массами. В широких ямах этот эффект не играет значительной роли, область локализации дырки определяется только шириной ямы, и соотношение между энергиями связи аналогично случаю бесконечно

глубокой ямы. В узкой квантовой яме легкая дырка локализована слабее, поэтому энергия связи экситона, образованного тяжелой дыркой, оказывается больше. В результате, кривые для легких и тяжелых дырок в случае ямы конечной глубины пересекаются.

4.2.2. Влияние электрического поля на экситонное поглощение света. Размерный эффект Штарка

По отношению к структуре с квантовыми ямами внешнее электрическое поле (в данном разделе обозначим его напряженность как \mathbf{F}) можно разложить на продольную составляющую, у которой вектор напряженности поля лежит в плоскости структуры, и на поперечную, с вектором поля, направленным вдоль нормали OZ к интерфейсам. Рассмотрим влияние внешнего электрического поля на поглощение света с энергией кванта вблизи ширины запрещенной зоны в двух случаях – для продольного поля и для поперечного поля.

Продольное поле.

Ситуация $\mathbf{F} \perp OZ$ в квантовых ямах мало отличается от случая объемного полупроводника. Электрическое поле, лежащее в плоскости квантовой ямы, добавляет член $e\mathbf{F} \cdot \mathbf{p}$ в уравнение (4.7). Это модифицирует взаимодействие между электроном и дыркой аналогично объемному случаю, когда наблюдается эффект Франца-Келдыша с учетом экситонов. Квантоворазмерные эффекты в данном случае проявляются слабо. Энергия экситона в электрическом поле незначительно уменьшается (аналог эффекта Штарка), кроме того, электрон уже не является полностью локализованным вблизи дырки из-за возможности туннелирования. Конечное время жизни экситона приводит к другой особенности – уширению пика поглощения. Описанные эффекты иллюстрируются рис. 4.5.

Оценить электрическое поле $F_{крит}$, в котором экситон должен полностью разрушиться, можно из условия

$$eF_{\text{крит}} a_B > R_{\text{ex}}^{КЯ}, \quad (4.12)$$

которое примерно соответствует понижению потенциального барьера до нуля (см. рис. 4.5, б). В полях, превышающих $F_{\text{крит}} \cong 10^3 \div 10^4$ В/см, электрон и дырку можно рассматривать как невзаимодействующие частицы и ожидать проявления «обычного» эффекта Франца-Келдыша, то есть «хвоста» межзонного поглощения при энергиях кванта $\hbar\omega > E_g + E_e^n + E_h^n$. Экситонный пик при этом пропадает. Отметим, что существенного сдвига пика экситонного поглощения в относительно слабых полях $F < F_{\text{крит}}$ не происходит.

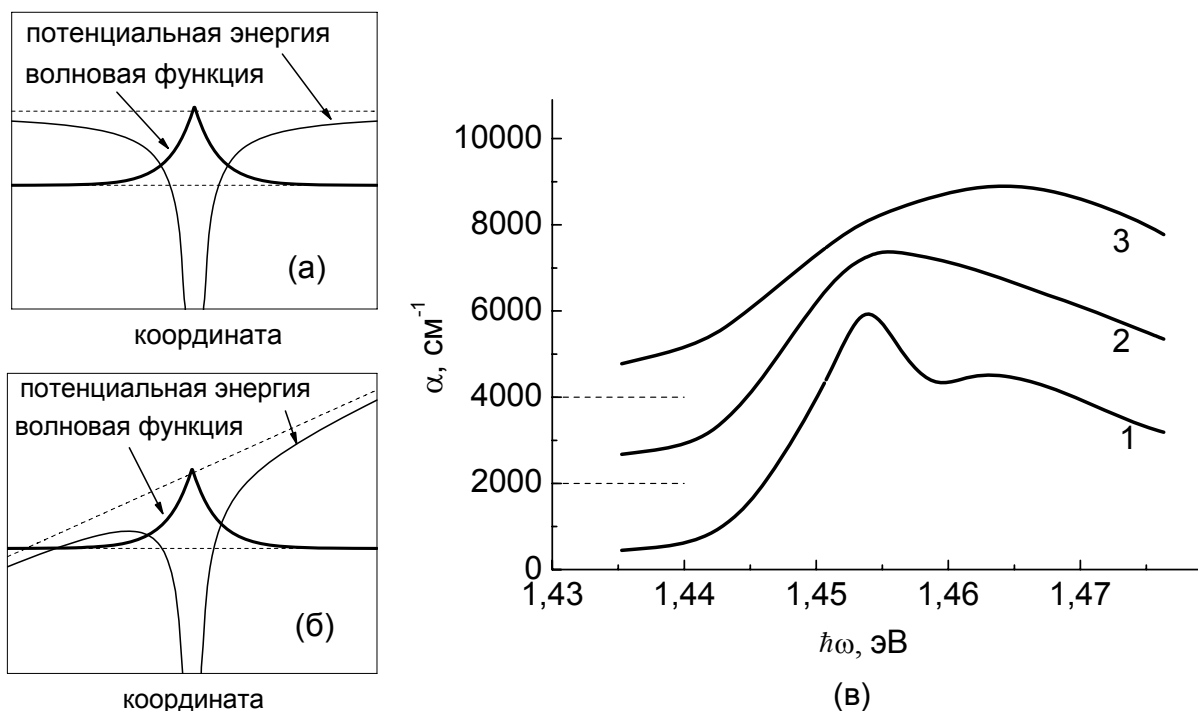


Рис. 4.5. Потенциальная энергия и волновая функция экситона (схематично).

a – в отсутствие электрического поля; *б* – в электрическом поле; *в* – спектр коэффициента поглощения света α в квантовой яме GaAs/AlGaAs шириной 9,5 нм в продольном электрическом поле. Электрическое поле F : 1 – 0 В/см; 2 – $1,6 \cdot 10^4$ В/см; 3 – $4,8 \cdot 10^4$ В/см. Данные из работы *D.A.B. Miller et al / Phys. Rev. B. – 1985. – Vol. 32. – P. 1043–1060*

Поперечное поле.

На рис. 4.6 показано, как изменяется профиль потенциала прямоугольной квантовой ямы и волновые функции электрона и дырки в поперечном электрическом поле.

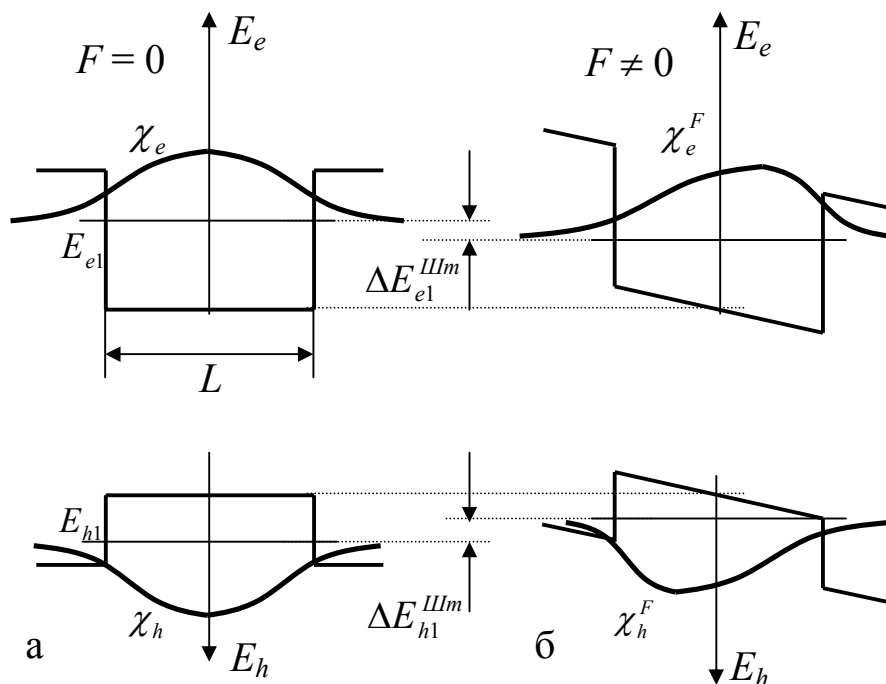


Рис. 4.6. Профиль потенциала прямоугольной квантовой ямы и волновые функции электрона и дырки без электрического поля (а) и в поперечном электрическом поле $\mathbf{F} \parallel OZ$ (б)

В электрическом поле происходит сдвиг уровней энергии в квантовой яме. По аналогии с объемным эффектом это явление называют *квантоворазмерным эффектом Штарка*. Оценим величину сдвига уровня энергии основного состояния в квантовой яме в поперечном электрическом поле.

Будем рассматривать потенциальную энергию в электрическом поле $V = eFz$ как возмущение в задаче о нахождении уровней энергии в квантовой яме. В первом порядке теории возмущения [4] энергетические уровни не изменяются, так как величина сдвига уровня $\Delta E^{III_{II}}$ равна среднему значению потенциала eFz в области ямы, то есть она равна нулю. Отличные от нуля поправки к уровням

размерного квантования E_i возникают во втором порядке, $\Delta E_i^{III} \propto F^2$. В случае невырожденного спектра имеем [4]:

$$\Delta E_i^{III} = \sum_{m \neq i} \frac{|V_{mi}|^2}{E_i - E_m}, \quad (4.13)$$

где V_{mi} – матричные элементы оператора энергии возмущения $V = eFz$, построенные по волновым функциям i -го и m -го состояний квантовой ямы; E_i, E_m – невозмущенные уровни энергии.

Поправка второго порядка к энергии основного уровня ($i = 1$) всегда отрицательна, так как в этом случае все разности энергий в (4.13) меньше нуля. Сдвиг остальных уровней в электрическом поле может быть как положительным, так и отрицательным, в зависимости от параметров структуры.

Для бесконечно глубокой ямы расчет штарковского сдвига уровней относительно прост. В такой яме $E_m \propto m^2$. Рассмотрим сдвиг уровня основного состояния ($i = 1$). Поскольку слагаемые в ряду (4.13) быстро убывают, ограничимся только вкладом второго уровня $E_2 = 4E_1$. Матричный элемент равен

$$V_{21} = \frac{2}{L} \int_{-L/2}^{L/2} \sin\left(\frac{2\pi z}{L}\right) \cdot eFz \cdot \cos\left(\frac{\pi z}{L}\right) dz = \frac{16}{9\pi^2} eFL,$$

так что

$$\Delta E_1^{III} \approx -\frac{256}{243\pi^4} \frac{(eFL)^2}{E_1}. \quad (4.14)$$

Этот результат можно выразить в форме зависимости относительного сдвига $\Delta E_1^{III} / (E_2 - E_1)$ от относительного изменения потенциальной энергии на ширине ямы $eFL / (E_2 - E_1)$:

$$\frac{\Delta E_1^{Шм}}{E_2 - E_1} \approx \frac{1}{10} \left(\frac{eFL}{E_2 - E_1} \right)^2. \quad (4.15)$$

Таким образом, в квантовой яме шириной 100 Å при расстоянии $E_2 - E_1 = 100$ мэВ сдвиг основного уровня энергии в электрическом поле $F = 10^5$ В/см составляет несколько мэВ.

Применим эти результаты в задаче об экситоне. Продольное электрическое поле такой величины в квантовой яме или поле в объемном полупроводнике уже разрушило бы экситон в силу соотношения (4.12). В случае поперечного электрического поля в квантовой яме (см. рис. 4.6) ситуация коренным образом меняется. Потенциал квантовой ямы является дополнительным фактором, удерживающим электрон и дырку на близком расстоянии – даже в сильном поперечном поле он не дает электрону и дырке удалиться на значительное расстояние, тем самым не позволяя экситону разрушиться. В результате, возникает штарковский сдвиг уровней электрона и дырки, который проявляется как сдвиг пика экситонного поглощения в длинноволновую область спектра.

Кроме того, поперечное поле возмущает форму волновых функций электрона и дырки, уменьшая их перекрытие. Это приводит к незначительному уменьшению экситонного поглощения, а также к ослаблению правил отбора, обусловленных симметрией волновых функций.

На рис. 4.7 приведен спектр поглощения света в структуре с квантовыми ямами в поперечном электрическом поле. Отметим, что спектры поглощения, изображенные на рис. 4.5 и 4.7, получены в идентичных структурах.

Из сравнения рис. 4.5 и 4.7 хорошо видно, что экситонные эффекты в поглощении света в поперечном поле сохраняются до больших значений электрического поля по сравнению со случаем продольного поля. Длинноволновый сдвиг пика в поперечном поле обусловлен штарковским сдвигом уровней электрона и дырки.

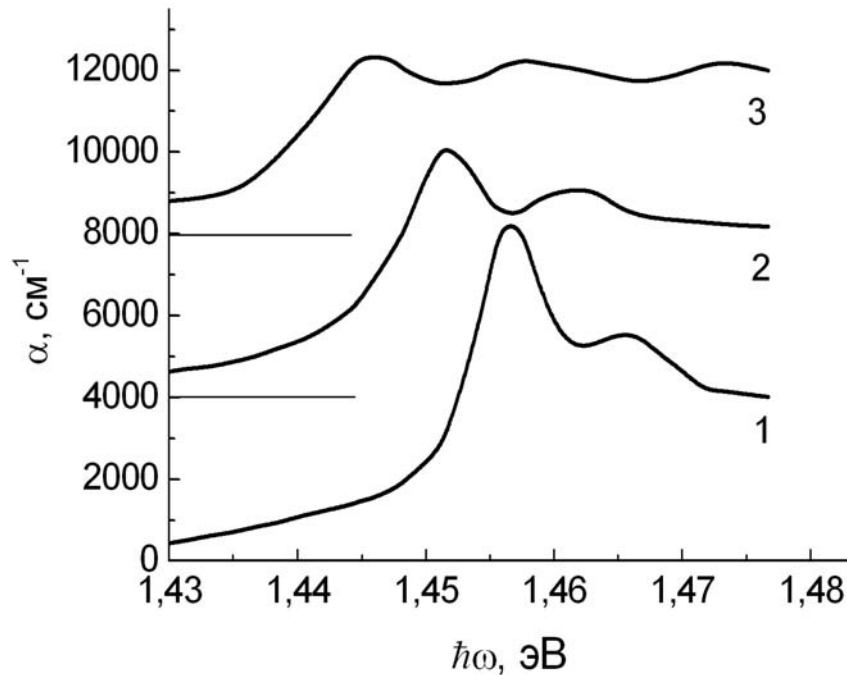


Рис. 4.7. Коэффициент поглощения света в квантовой яме GaAs / AlGaAs в поперечном электрическом поле.

Параметры ямы приведены в подписи к рис. 4.5. Электрическое поле F : 1 – 10^4 В/см; 2 – $4,7 \cdot 10^4$ В/см; 3 – $7,3 \cdot 10^4$ В/см. Рис. из книги [12]

Сдвиг пика экситонного поглощения в электрическом поле в полупроводниках используется в малоинерционных модуляторах инфракрасного излучения. Максимальное поле, а значит, и глубина модуляции ограничиваются процессами разрушения экситона в электрическом поле. Поскольку в квантовых ямах экситон более устойчив к поперечному электрическому полю, модулятор на основе структур с квантовыми ямами будет более эффективным.

4.3. ВЛИЯНИЕ НЕПАРАБОЛИЧНОСТИ И МНОГОЧАСТИЧНЫХ ЭФФЕКТОВ НА СПЕКТР МЕЖПОДЗОННОГО ПОГЛОЩЕНИЯ СВЕТА В КВАНТОВЫХ ЯМАХ

Энергия кванта, при которой происходит резонансное межподзонное поглощение света (переходы типа 2 между подзонами i и k на рис. 4.1, б), определяется разностью энергий размерного

квантования соответствующих подзон, $E_i - E_k$, которая обычно по порядку совпадает с самими энергиями E_i и E_k . Часто требуется провести точный расчет резонансной энергии кванта, например, при разработке фотоприемников инфракрасного излучения на межподзонных переходах. Поэтому мы рассмотрим здесь ряд факторов, которые влияют на положение уровней размерного квантования, и которые обычно не учитываются в одноэлектронном приближении и в приближении постоянной эффективной массы электрона. Учет этих факторов приводит к дополнительной зависимости положения пика межподзонного поглощения в квантовых ямах от концентрации электронов. Одной из причин указанной зависимости является *деполяризионный сдвиг* пика; он допускает описание в рамках одноэлектронного приближения и рассмотрен в [5], поэтому здесь мы не будем на нем останавливаться.

4.3.1. Эффекты непараболичности

Многие полупроводниковые материалы, применяемые в структурах с квантовыми ямами, имеют непараболический закон дисперсии энергии носителей заряда в зоне проводимости и валентной зоне. Это, естественно, приводит к тому, что подзоны размерного квантования в квантовых ямах также не являются параболическими.

Детальный расчет зонного спектра можно выполнить, например, *kp*-методом, известным в теории твердого тела; основы этого метода кратко рассмотрены в первой части нашего учебного пособия. Однако, если не ставить задачу описания зон проводимости совместно со сложной структурой валентных зон в рамках единой многозонной модели, как это делается в *kp*-методе, то можно ограничиться более простым подходом. Его суть заключается в аппроксимации закона дисперсии в самой нижней зоне проводимости разложением энергии электрона по степеням волнового вектора.

Коэффициенты разложения определяются из сравнения с многозонным *kp*-расчетом, включающим не только валентные зоны, но и вышележащие ветви зоны проводимости.

Рассмотрим этот подход применительно к основной зоне проводимости полупроводниковых соединений A^3B^5 , следуя работе *U.Ekenberg* // *Phys. Rev. B.* – 1989. – Vol. 40. – P. 7714–7726.

Если в *kp*-модель Кейна включить кроме нижней зоны проводимости (Γ_6) еще и вышележащие зоны Γ_7 , Γ_8 (14-зонная модель), то закон дисперсии $E(\mathbf{k})$ для нижней ветви зоны проводимости становится непараболическим, анизотропным, и, кроме того, в нем появляются члены, снимающие двукратное спиновое вырождение. С точностью до членов 4-го порядка по \mathbf{k} этот закон дисперсии имеет вид:

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \alpha_0 k^4 + \beta_0 (k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2) \pm \gamma_0 [k^2 (k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2) - 9k_x^2 k_y^2 k_z^2]^{1/2},$$

где предполагается, что координатные оси x , y , z направлены вдоль главных осей кубической решетки. Слагаемое с коэффициентом γ_0 описывает спиновое расщепление зоны проводимости, обусловленное отсутствием симметрии к инверсии в кристаллах A^3B^5 со структурой цинковой обманки (симметрия T_d). Ниже спиновым расщеплением пренебрегаем, то есть полагаем, что закон дисперсии в зоне проводимости объемного материала описывается степенным выражением:

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \alpha_0 k^4 + \beta_0 (k_x^2 k_y^2 + k_y^2 k_z^2 + k_z^2 k_x^2). \quad (4.16)$$

Здесь m – объемная эффективная масса электрона, а коэффициенты α_0 и β_0 характеризуют непараболичность и анизотропию зоны

проводимости; все эти параметры могут быть определены из *kp*-расчета и для конкретного полупроводника считаются известными. Для GaAs и Al_xGa_{1-x}As параметры α₀ и β₀ принимают отрицательные значения.

Будем рассматривать симметричную квантовую яму с плоскостью интерфейсов, перпендикулярной направлению (001) (ось *z*). Выделив в (4.16) члены с *k_z*, получим:

$$E(\mathbf{k}) = \alpha_0 k_z^4 + \left[\frac{\hbar^2}{2m} + (2\alpha_0 + \beta_0)(k_x^2 + k_y^2) \right] k_z^2 + \frac{\hbar^2}{2m}(k_x^2 + k_y^2) + (2\alpha_0 + \beta_0)k_x^2 k_y^2. \quad (4.17)$$

Следуя стандартной процедуре метода эффективной массы, введем гамильтониан $\hat{H}(k_x, k_y, -i d/dz)$, заменив в (4.17) составляющую волнового вектора *k_z* оператором $-i d/dz$; кроме того, добавим ограничивающий потенциал квантовой ямы *U_c(z)* (потенциальный рельеф дна зоны проводимости), считая, что квантовая яма расположена в области $-L/2 < z < L/2$.

Рассмотрим сначала яму с бесконечно высокими барьерами; в области ямы полагаем *U_c(z) = 0*. В данном подходе «уравнение Шредингера»

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r})$$

является дифференциальным уравнением 4-го порядка (из-за члена 4-ой степени по *k_z* в (4.17)). Тем не менее, его решения можно представить в привычном виде:

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{ik_x x + ik_y y} \varphi(z).$$

Волновая функция $\varphi(z)$, обращающаяся на стенках ямы в ноль, имеет вид $\cos(k_n z)$ при нечетных n и $\sin(k_n z)$ при четных n , а z -компонента волнового вектора k_z принимает квантованные значения:

$$k_z \equiv k_n = \frac{\pi}{L} n, \quad n = 1, 2, \dots \quad (4.18)$$

При $k_x = k_y = 0$, как видно из (4.17), размерно-квантованные уровни энергии даются формулой

$$E_n(\mathbf{k}_{\parallel} = 0) = \alpha_0 k_n^4 + \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m}. \quad (4.19)$$

Введем формально «поперечную» эффективную массу, зависящую от энергии, $m_{\perp}(E_n)$:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m_{\perp}(E_n)}, \quad (4.20)$$

тогда из (4.19) получим:

$$m_{\perp}(E) = \frac{m}{2\alpha'E} \left(1 - (1 - 4\alpha'E)^{1/2} \right), \quad (4.21)$$

где $\alpha' = |\alpha_0| (2m/\hbar^2)^2$. Для GaAs $\alpha' = 0,64 \text{ эВ}^{-1}$. При малой энергии $\alpha'E \ll 1$:

$$m_{\perp}(E_n) \approx m(1 + \alpha'E_n). \quad (4.22)$$

Следует подчеркнуть, что эта масса введена только в связи с дискретными уровнями энергии (4.20); она не имеет отношения к

какому-либо закону дисперсии и не описывает транспортных свойств.

Теперь рассмотрим движение с ненулевым импульсом в плоскости квантовой ямы, $k_{\parallel} = (k_x^2 + k_y^2)^{1/2}$, по-прежнему считая барьеры бесконечно высокими. Закон дисперсии $E_n(\mathbf{k}_{\parallel})$ получается заменой в (4.17) k_z на k_n . Коэффициент при k_{\parallel}^2 в выражении для энергии будет равен

$$\frac{\hbar^2}{2m} + (2\alpha_0 + \beta_0)k_n^2. \quad (4.23)$$

Зависящую от энергии «параллельную» массу $m_{\parallel}(E_n)$ введем, приравнявая коэффициент (4.23) выражению $\hbar^2/2m_{\parallel}(E_n)$. В первом приближении по E_n :

$$m_{\parallel}(E_n) \approx m (1 + (2\alpha' + \beta')E_n), \quad (4.24)$$

где $\beta' = |\beta_0| (2m/\hbar^2)^2$. Для GaAs $\beta' = 0,70 \text{ эВ}^{-1}$.

В случае квантовой ямы с барьерами конечной высоты уже не удастся независимо рассматривать перпендикулярное и параллельное слоям движения. Кроме того, существует проблема выбора граничных условий для волновых функций $\varphi(z)$, удовлетворяющих уравнению 4-го порядка. Однако трансцендентные дисперсионные уравнения, отвечающие различным вариантам граничных условий, как оказалось, дают не сильно различающиеся результаты. На рис. 4.8 приведены зависимости, иллюстрирующие эти результаты в терминах поперечной массы, характеризующей непараболичность в расположении размерно-квантованных уровней, и продольной массы, отражающей непараболичность плоскостного закона дисперсии в подзонах размерного квантования. С увеличением ширины квантовой ямы величины обеих эффективных масс стремятся

к своему объемному значению, составляющему для GaAs около 0,067 массы свободного электрона.

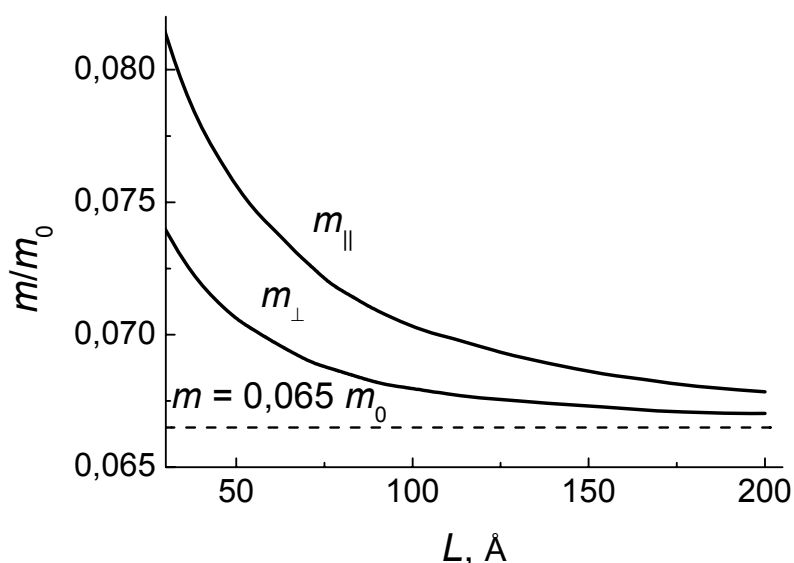


Рис. 4.8. Зависимости продольной и поперечной эффективных масс от ширины квантовой ямы GaAs / Ga_{0,7}Al_{0,3}As

Следует отметить, что учет разницы эффективных масс электрона в материалах квантовой ямы и барьера привносит дополнительные поправки. С уменьшением ширины ямы увеличивается проникновение волновой функции под барьер, так что электронное состояние в квантовой яме можно рассматривать как суперпозицию состояний с различными массами. Обычно разница между эффективными массами носителя заряда в яме и в барьере невелика, и данная поправка является малой.

Поскольку поперечная масса электрона в квантовой яме определяет положение уровней размерного квантования, она влияет на положение пика межподзонного поглощения света. От величины продольной массы зависит кривизна дисперсионных кривых $E_n(\mathbf{k}_{\parallel})$ и спектральная форма пика – спектр межподзонного поглощения света изменяется по сравнению со случаем параболических подзон. Разберем влияние непараболичности дисперсионных кривых $E_n(\mathbf{k}_{\parallel})$ на спектр межподзонного поглощения света.

Рассмотрим поглощение света при межподзонных переходах электронов между первой и второй подзонами размерного квантования. Коэффициент межподзонного поглощения света может быть записан в следующем виде [5]:

$$\alpha(\omega) = \frac{4\pi^2 e^2}{ncS\ell\omega m^2} \sum_{\mathbf{k}'_{\parallel}} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}} \left| e_{\omega z} \delta_{\mathbf{k}'_{\parallel}, \mathbf{k}_{\parallel}} \langle \varphi_2 | \hat{p}_z | \varphi_1 \rangle \right|^2 [f(E_1) - f(E_2)] \times \quad (4.25)$$

$$\times \delta(E_1 - E_2 - \hbar\omega),$$

где n – показатель преломления объемного материала (полагаем, что показатели преломления материалов ямы и барьера близки); S – площадь структуры; ℓ – нормировочная длина (ее обычно выбирают равной ширине квантовой ямы для одиночной ямы или периоду структуры в случае множественных квантовых ям), m – эффективная масса объемного материала; $e_{\omega z}$ – z -компонента единичного вектора поляризации света \mathbf{e}_{ω} ; $\varphi_i(z)$ – плавные огибающие волновой функции, описывающие движение электрона i -ой подзоны вдоль оси z ; $f(E_i)$ – функция распределения электронов i -ой подзоны по энергиям; энергия электрона в i -ой подзоне: $E_i = E_i^0 + \hbar^2 k_{\parallel}^2 / (2m)$. Отметим, что коэффициент поглощения света может быть выражен и через матричный элемент оператора импульса \hat{p}_z , как в (4.25), и через матричный элемент оператора координаты z (или дипольного момента e_z). Между этими матричными элементами существует простая связь (в пренебрежении зависимостью эффективной массы от координаты z):

$$\langle \varphi_2 | \hat{p}_z | \varphi_1 \rangle = im \frac{E_2 - E_1}{\hbar} \langle \varphi_2 | z | \varphi_1 \rangle. \quad (4.26)$$

В модели параболических подзон все электроны первой подзоны могут принимать участие в поглощении света с энергией

кванта $\hbar\omega_{\text{рез}} = E_2^0 - E_1^0$. В связи с этим спектр поглощения в отсутствие столкновительного уширения линии (то есть в предположении бесконечного времени релаксации импульса: $\tau_p = \infty$) имеет форму δ -образного пика. Это прямо следует из (4.25), так как аргумент δ -функции в этом случае не зависит от \mathbf{k}_{\parallel} , и она может быть вынесена из под знаков сумм. Иллюстрацией к такой ситуации служит рис. 4.9.

Учесть столкновительное уширение можно феноменологически; при этом для получения реального спектра межподзонного поглощения достаточно заменить δ -функцию в (4.25) на лоренциан:

$$\delta(E_1 - E_2 - \hbar\omega) \rightarrow \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{(E_2^0 - E_1^0 - \hbar\omega)^2 + \Gamma^2}, \quad (4.27)$$

где параметр $\Gamma \cong \hbar/\tau_p$ равен спектральной полуширине пика поглощения.

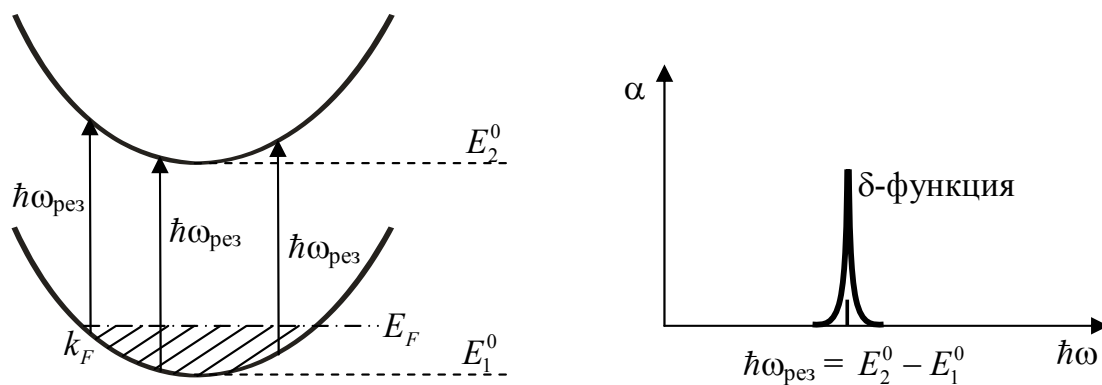


Рис. 4.9. Схема межподзонных оптических переходов и спектр поглощения в отсутствие столкновительного уширения линии для случая параболических подзон

Зависимость продольной эффективной массы от энергии размерного квантования (4.24) приведет к различию кривизны дисперсионных кривых для первой и второй подзоны, что схематично показано на рис. 4.10. Теперь энергия кванта света, соответствующая

оптическому переходу, будет разной для разных состояний электрона в первой подзоне.

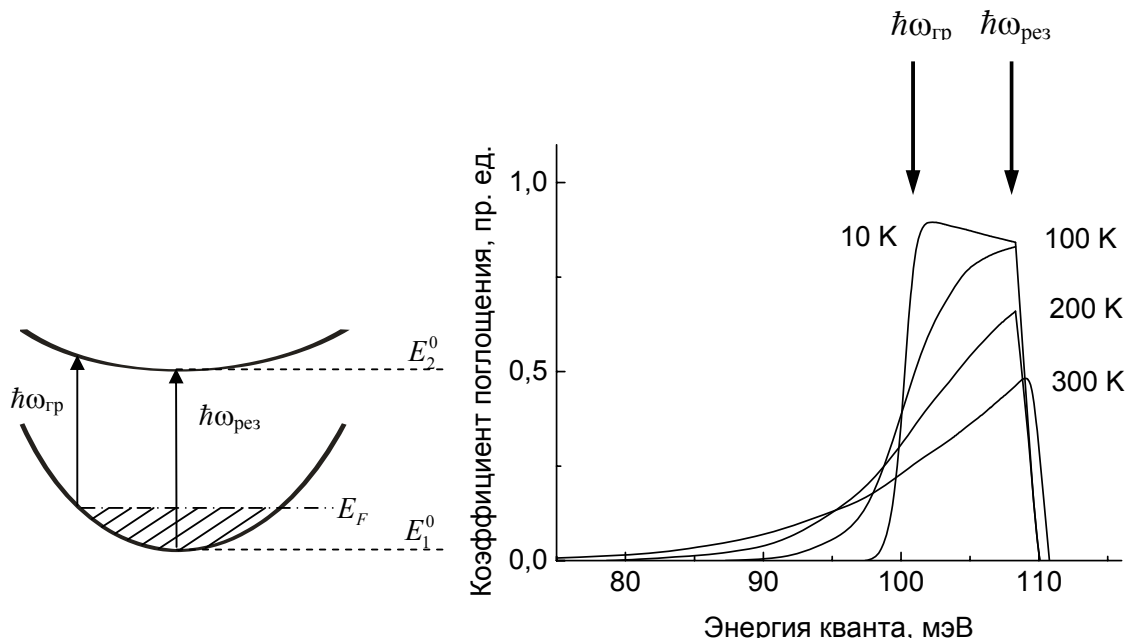


Рис. 4.10. Схема межподзонных оптических переходов

($\hbar\omega_{\text{гр}}$ соответствует переходам электронов, имеющих квазиволновой вектор Ферми \mathbf{k}_F) и спектры поглощения с учетом непараболичности в отсутствие столкновительного уширения линии.

Спектры поглощения рассчитаны для квантовой ямы GaAs / Al_{0,3}Ga_{0,7}As с шириной $L = 75 \text{ \AA}$ и уровнем легирования $N_S = 10^{12} \text{ см}^{-2}$. Данные из работы *F.Szmulowicz et al / Superlattices and Microstructures. – 1990. – Vol. 8. – P. 63–67*

Рассчитаем спектр поглощения света в квантовой яме бесконечной глубины, предполагая состояния второй подзоны незаполненными, $f(E_2) = 0$. Матричный элемент импульса для состояний бесконечной ямы:

$$\left| \langle \varphi_2 | \hat{p}_z | \varphi_1 \rangle \right| = \frac{8\hbar}{3L}. \quad (4.28)$$

Подставим (4.28) в (4.25) и перейдем от суммирования к интегрированию:

$$\alpha(\omega) = \frac{256\pi^2 e^2 \hbar^2 e_{\omega z}^2}{9ncSL^2 \ell \omega m^2} \int f(E_1) \delta(E_1 - E_2 - \hbar\omega) \frac{2S}{(2\pi)^2} d\mathbf{k}_{\parallel}. \quad (4.29)$$

В этом выражении следует положить $E_i = E_i^0 + \hbar^2 k_{\parallel}^2 / (2m_{\parallel}^i)$, где m_{\parallel}^i – продольная эффективная масса в i -ой подзоне. Далее, переходя в (4.29) к интегрированию по E_1 , получим:

$$\alpha(\omega) \propto \frac{f(E_1^{pe3})}{\omega}, \quad (4.30)$$

где энергия начального состояния в первой подзоне $E_1^{pe3}(\omega)$ является решением уравнения

$$E_2^0 + \frac{m_{\parallel}^1}{m_{\parallel}^2} (E_1 - E_1^0) - E_1 = \hbar\omega, \quad (4.31)$$

отражающего закон сохранения энергии при оптическом переходе между первой и второй подзонами.

Для сильно вырожденного электронного газа спектр поглощения будет лежать в диапазоне энергий кванта от $\hbar\omega_{\text{гр}}$ до $E_2^0 - E_1^0$ (см. рис. 4.10), где $\hbar\omega_{\text{гр}}$ соответствует переходам электронов, имеющих квазиволновой вектор Ферми \mathbf{k}_F .

Таким образом, спектр межподзонного поглощения в достаточно сильно легированных структурах с непараболическим законом дисперсии располагается по оси энергий квантов слева от точки, соответствующей расстоянию между уровнями размерного квантования $\hbar\omega = E_2^0 - E_1^0$. Учет столкновительного уширения сгладит спектры, приведенные на рис. 4.10, однако основные особенности сохранятся – пик поглощения будет асимметричным, а

его центр будет сдвинут в область меньших энергий кванта по сравнению с ожидаемым положением. Эффективный сдвиг резонансной энергии перехода будет увеличиваться с ростом уровня легирования в соответствии с уменьшением энергии $\hbar\omega_{\text{гр}}$ (рис. 4.10).

4.3.2. Основные положения приближений Хартри и Хартри–Фока

До сих пор мы рассматривали эффекты размерного квантования без учета электрон-электронного взаимодействия, то есть применяли одноэлектронное приближение. Однако для точного расчета энергетического спектра при высоких концентрациях электронов в квантовых ямах необходим учет многочастичных эффектов.

Описание многоэлектронной системы в квантовой механике является сложной задачей [4]; здесь мы рассмотрим ее только кратко.

Для учета кулоновского взаимодействия электронов друг с другом необходимо ввести многочастичную волновую функцию Ψ , зависящую от пространственных координат и от спинов всех электронов в системе. Если не учитывать спин, то волновая функция будет зависеть только от координат, $\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$, и она должна удовлетворять уравнению Шредингера вида:

$$\left(\sum_{i=1}^N \hat{H}(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \right) \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = E \Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N), \quad (4.32)$$

где $\hat{H}(\mathbf{r}_i) = \frac{\hat{\mathbf{p}}_i^2}{2m} + U(\mathbf{r}_i)$ – гамильтониан i -го электрона, $U(\mathbf{r}_i)$ – потенциальная энергия электрона в поле кристаллической решетки.

Точно решить уравнение (4.32) для большого числа электронов невозможно (к тому же, это было бы бесполезно из-за большого числа аргументов волновой функции), поэтому следует применять

приближенные методы или модели. Первым из таких методов, в порядке возрастания сложности, является приближение Хартри. В нём волновая функция системы представляется в виде произведения пробных одночастичных волновых функций:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \psi_1(\mathbf{r}_1) \psi_2(\mathbf{r}_2) \cdots \psi_N(\mathbf{r}_N), \quad (4.33)$$

удовлетворяющих одночастичным уравнениям вида

$$\left(\hat{H}(\mathbf{r}_i) + U_{\text{Хартри}}(\mathbf{r}_i) \right) \psi_i(\mathbf{r}_i) = E_i \psi_i(\mathbf{r}_i) \quad (4.34)$$

с потенциалом

$$U_{\text{Хартри}}(\mathbf{r}_i) = \sum_{j \neq i} \int \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} |\psi_j(\mathbf{r}_j)|^2 d\mathbf{r}_j. \quad (4.35)$$

Одноэлектронные волновые функции $\psi_i(\mathbf{r}_i)$, входящие в (4.33) – (4.35), и уровни энергии E_i могут быть найдены вариационным методом.

Потенциал Хартри (4.35), действующий на i -й электрон, создается всеми остальными электронами. Входящий в потенциал Хартри вклад

$$\frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} |\psi_j(\mathbf{r}_j)|^2 dV_j \quad (4.36)$$

можно рассматривать как кулоновский потенциал в точке \mathbf{r}_i , создаваемый j -ым электроном, находящимся в окрестности точки \mathbf{r}_j с

вероятностью $|\psi_j(\mathbf{r}_j)|^2 dV$. Поскольку потенциал Хартри для i -го электрона зависит от волновых функций $\psi_j(\mathbf{r}_j)$ всех остальных электронов, решение уравнений Хартри (4.34) – (4.35) ищут методом последовательных приближений. Это означает, что по начальным пробным функциям находят потенциал Хартри (4.35) и затем, решая (4.34), получают одночастичные функции $\psi_i(\mathbf{r}_i)$ следующего приближения. По ним заново вычисляют потенциал Хартри и так далее – до тех пор, пока результат перестанет изменяться (в пределах заданной точности). Полученное в результате решение является самосогласованным.

Недостатком метода Хартри является то, что многоэлектронная волновая функция (4.33) может не удовлетворять принципу неразличимости тождественных частиц [4], который требует, чтобы она была антисимметрична к перестановкам одновременно координатных и спиновых переменных для любой пары электронов (можно рассматривать и перестановку полных наборов квантовых чисел, описывающих одночастичные состояния). Из этого требования следует принцип запрета Паули, физическое значение которого хорошо известно. Таким образом, в тех задачах, для которых принцип Паули существен, приближение Хартри может оказаться недостаточным.

Более совершенным является метод Хартри–Фока. В основе этого метода, учитывающего спин электронов и обеспечивающего антисимметрию многочастичной волновой функции, лежит представление волновой функции электронов в форме определителя:

$$\Psi(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{p_1}(\xi_1) & \psi_{p_1}(\xi_2) & \dots & \psi_{p_1}(\xi_N) \\ \psi_{p_2}(\xi_1) & \psi_{p_2}(\xi_2) & \dots & \psi_{p_2}(\xi_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{p_N}(\xi_1) & \psi_{p_N}(\xi_2) & \dots & \psi_{p_N}(\xi_N) \end{vmatrix}. \quad (4.37)$$

Здесь ξ означает совокупность координат \mathbf{r} и проекции спина s_z электрона. Перестановка квантовых чисел p_i и p_j эквивалентна перестановке двух строк в определителе (4.37), в результате чего он меняет знак – имеет место требуемая антисимметрия. Если же два электрона находятся в одном и том же состоянии ($p_i = p_j$), то определитель (4.37) содержит две одинаковые строки и поэтому тождественно равен нулю; тем самым выполняется принцип запрета Паули.

Использование в вариационном подходе функции (4.37) вместо (4.33) приводит к следующим уравнениям:

$$\left(\hat{H}(\mathbf{r}_i) + U_{\text{Хартри}}(\mathbf{r}_i) - \hat{U}_{\text{обмен}}(\mathbf{r}_i) \right) \psi_i(\mathbf{r}_i) = E_i \psi_i(\mathbf{r}_i), \quad (4.38)$$

где

$$\hat{U}_{\text{обмен}}(\mathbf{r}_i) \psi_i(\mathbf{r}_i) = \sum_{j \neq i} \left[\int \frac{e^2}{\epsilon |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|} \psi_j^*(\mathbf{r}_j) \psi_i(\mathbf{r}_j) d\mathbf{r}_j \right] \psi_j(\mathbf{r}_i), \quad (4.39)$$

причем теперь интегрирование подразумевает и суммирование по спиновым переменным. Везде учитываются только вклады заполненных электронами состояний.

Слагаемое (4.39) называется обменным взаимодействием. Оно не имеет наглядной классической интерпретации, его появление целиком связано с наличием у электрона спина.

4.3.3. Положение пика межподзонного поглощения света в реальных квантовых ямах

Рассмотрим влияние обсуждавшихся выше факторов на положение пика межподзонного поглощения в квантовых ямах.

На рис. 4.11 приведены расчетные и измеренные зависимости положения пика межподзонного поглощения от концентрации свободных электронов в структуре с квантовыми ямами GaAs / AlGaAs. Поглощение света обусловлено переходами электронов между первой и второй подзонами размерного квантования. Экспериментальные значения определялись для образцов с различным уровнем легирования. Обсудим эти результаты.

1. Кривая (1) рассчитана в одноэлектронном приближении с учетом непараболичности энергетического спектра в подзонах размерного квантования с использованием методики, описанной в разделе 4.3.1. Увеличение концентрации электронов в первой подзоне приводит к росту уровня Ферми, в связи с чем наблюдается сдвиг линии поглощения в область меньших энергий кванта.

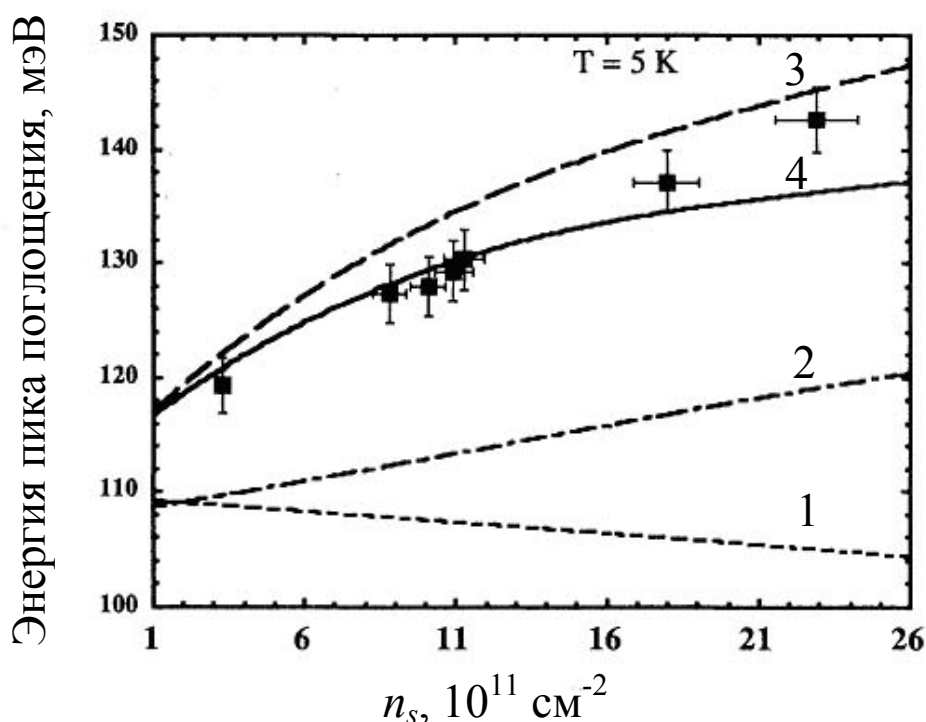


Рис. 4.11. Рассчитанное (линии) и определенное экспериментально (точки) положение пика межподзонного поглощения в структуре, состоящей из 100 квантовых ям GaAs / AlGaAs шириной 75 Å, разделенных барьерами Al_{0,3}Ga_{0,7}As шириной 100 Å. Пояснения к кривым приведены в тексте. Данные из работы *M.O.Manasreh et al / Phys. Rev. B. – 1991. – Vol. 43. – P. 9996–9999*

2. Следующим шагом является учет деполяризационного сдвига пика межподзонного поглощения. Как и влияние непараболичности, этот фактор не меняет энергетического спектра электрона, а приводит к тому, что резонанс межподзонного поглощения происходит при энергии кванта, отличной от расстояния между подзонами. Явление деполяризации описано в [5], поэтому здесь мы не будем входить в подробности. Упомянем лишь, что из-за влияния эффектов деполяризации в простейшей модели пик межподзонного поглощения будет наблюдаться на частоте ω , определяемой соотношением

$$\omega^2 = \omega_0^2 + \omega_p^2, \quad (4.40)$$

где $\hbar\omega_0 = E_2^0 - E_1^0$ определяется расстоянием между подзонами, а плазменная частота для межподзонных переходов

$$\omega_p^2 = \frac{4\pi e^2 N_S f_{21}}{\epsilon m L}, \quad (4.41)$$

где введена сила осциллятора межподзонного перехода

$$f_{21} = \frac{2m}{\hbar^2} \hbar\omega_0 \langle \varphi_2 | z | \varphi_1 \rangle^2. \quad (4.42)$$

Выражение (4.40) справедливо лишь в приближении Хартри. Если учесть дополнительные поправки, связанные с обменным взаимодействием, то выражение для резонансной частоты в пренебрежении вкладами других подзон может быть записано в следующем виде:

$$\omega = \omega_0 \sqrt{1 + \phi - \beta}, \quad (4.43)$$

где коэффициент ϕ вычисляется в приближении Хартри:

$$\phi = 2 \frac{4\pi e^2 N_S}{\varepsilon \hbar \omega_0} S_{22}, \quad (4.44)$$

$$S_{22} = \int_0^\infty dz \left(\int_0^z \phi_2(z) \phi_1(z) dz \right)^2, \quad (4.45)$$

а коэффициент β , возникающий при учете обменного взаимодействия, описывает экситоноподобный эффект взаимодействия возбужденного электрона во второй подзоне с корреляционной «дыркой», оставшейся в первой подзоне. Дело в том, что из-за обменного взаимодействия электрон дополнительно отталкивает от себя другие электроны, результатом чего и является «дырка» в исходной подзоне:

$$\beta = -\frac{2N_S}{\hbar \omega_0} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \phi_2(z)^2 \phi_1(z)^2 \frac{\partial V_{xc}(N_S(z))}{\partial N_S(z)}. \quad (4.46)$$

Чтобы рассчитать коэффициент β , необходимо знать обменно-корреляционный потенциал V_{xc} , являющийся функцией локальной электронной плотности $N_S(z)$ (см., например, [10]).

Результаты расчета по формуле (4.43), учитывающей деполяризационный сдвиг и экситоноподобный эффект, представлены на рис. 4.11 в виде кривой (2).

3. При высоких значениях электронной концентрации следует ожидать дальнейшего влияния многочастичных эффектов на спектр электронных состояний в квантовой яме. Это влияние обусловлено потенциалом Хартри и обменным потенциалом в гамильтониане электронов. Сдвиг n -го энергетического уровня, связанный с обменным взаимодействием, может быть получен из (4.38) и (4.39); он выражается следующей формулой:

$$\Delta E_n^{обмен} = -\sum_m \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \psi_m^*(\mathbf{r}') \psi_n(\mathbf{r}') \psi_m(\mathbf{r}) \psi_n^*(\mathbf{r}), \quad (4.47)$$

где суммирование ведется по всем подзонам, заполненным хотя бы частично.

Из (4.47) видно, что существенный вклад в обменный сдвиг энергетических уровней данной подзоны вносит взаимодействие электрона с другими электронами, находящимися в той же подзоне ($n = m$). Это связано с тем, что при $n = m$ перекрытие волновых функций в интеграле (4.47) сильнее, чем при $n \neq m$. Однако суммирование ведется только по заполненным состояниям, а поскольку состояния основной подзоны обычно заполнены сильнее, чем состояния остальных подзон, уровни основной подзоны и сдвигаются сильнее. Это приводит к увеличению энергетического расстояния между подзонами и к сдвигу пика межподзонного поглощения в область больших энергий кванта. Учет обменных поправок по формуле (4.47) приводит к зависимости положения пика межподзонного поглощения от уровня легирования, изображенной на рис. 4.11 кривой (3).

4. Сдвиг энергии уровня, связанный с прямым кулоновским взаимодействием между электронами (с потенциалом Хартри) в квантовой яме, также определяется из формул (4.38) и (4.35):

$$\Delta E_n^{Хартри} = \sum_m \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \frac{e^2}{\varepsilon |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} |\psi_n(\mathbf{r}')|^2 |\psi_m(\mathbf{r})|^2. \quad (4.48)$$

Однако в легированных квантовых ямах в дополнение к (4.48) следует учитывать также кулоновское взаимодействие электрона с ионами примеси. Соответствующая энергия взаимодействия имеет другой знак. Если легирование проводится непосредственно в квантовую яму, то сдвиг уровней оказывается невелик. Результаты, приведенные на рис. 4.11, получены как раз для такого случая. Учет

прямого кулоновского взаимодействия приводит к относительно небольшому сдвигу пика, что отражается кривой (4). Как и для случая обменного взаимодействия, главным образом, сдвигаются уровни основного состояния. Сдвиг уровня имеет обратный знак, что приводит к сдвигу пика поглощения в область меньших энергий кванта.

В рассматриваемом случае влияние прямого кулоновского взаимодействия на положение уровней невелико по сравнению с влиянием обменного взаимодействия, однако следует отметить, что в случае селективного легирования структуры в области барьера кулоновское взаимодействие с ионами примеси уменьшается, что приводит к увеличению роли добавки (4.48).

Сравнение результатов расчета и эксперимента (рис. 4.11) приводит к заключению, что проведенный учет влияния различных факторов на положение пика межподзонного поглощения позволяет достаточно точно рассчитать положение пика. Отметим также, что учет этих факторов совершенно необходим, поскольку при высоких уровнях легирования пик поглощения сдвигается на значительную величину (около 30 мэВ) от значения, рассчитанного в простейшей модели.

4.3.4. Влияние разогрева электронного газа на межподзонное поглощение света в квантовых ямах

Продольное электрическое поле, приложенное к структуре с легированными квантовыми ямами, приводит не только к дрейфу электронов, то есть к протеканию электрического тока, но и к разогреву электронного газа, то есть к увеличению средней энергии электронов. В отличие от нагревания электронов при разогреве решетки, такое изменение средней энергии (или температуры) электронов происходит с малой инерционностью: характерное время определяется временем релаксации электронов по энергии и

составляет величину порядка 10^{-10} с, см. [13]. Рассмотрим, как разогрев электронов в электрическом поле влияет на оптические свойства квантовых ям, в частности, на коэффициент межподзонного поглощения света и покажем, что возможно создание малоинерционного электрооптического модулятора лазерного излучения, работающего в диапазоне длин волн, соответствующих межподзонным переходам ($\lambda \cong 4 - 15$ мкм).

Рассчитаем трансформацию линии межподзонного поглощения при разогреве электронов электрическим полем в структуре, имеющей 50 периодов легированных квантовых ям из GaAs шириной 10,2 нм, разделенных нелегированными барьерами из $Al_{0,33}Ga_{0,67}As$ шириной 25,4 нм. Поверхностная концентрация электронов составляла $4,1 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$ (см. *Воробьев Л.Е.* Двухлучепреломление и поглощение света при межподзонных переходах горячих электронов в квантовых ямах / Л.Е.Воробьев, И.И.Сайдашев, Д.А.Фирсов, В.А.Шалыгин // Письма в ЖЭТФ. – 1998. – Том. 65. – С. 525–530).

В отсутствие разогрева электронов линия равновесного поглощения при температуре решетки 77 К находится при энергии кванта $h\nu = 111$ мэВ. Влияние эффектов непараболичности на энергетический спектр электрона в подзонах может быть учтено с помощью модели, описанной в разделе 4.3.1. Напомним, что в соответствии с этой моделью, кривизна дисперсионных кривых $E_n(k_{||})$ для основной ($n = 1$) и возбужденной ($n = 2$) подзон существенно различна, что уже само по себе приводит к спектральному сдвигу линии поглощения при разогреве электронов за счет перераспределения электронов по состояниям в \mathbf{k} -пространстве (см. рис. 4.10).

Однако значительно более заметное влияние на трансформацию линии межподзонного поглощения при разогреве электронов в данной структуре оказывает их обменное взаимодействие. Из-за обменных эффектов перераспределение электронов в \mathbf{k} -пространстве

при их разогреве также сопровождается изменением формы дисперсионных кривых $E_n(k_{\parallel})$.

Для вычисления обменных поправок к энергетическому спектру двумерных электронов используем результаты раздела 4.3.3. Для ненулевой электронной температуры соотношение (4.47) может быть переписано следующим образом:

$$\Delta E_n^{обмен}(\mathbf{k}_{\parallel}) = -\frac{e^2}{\varepsilon} \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \sum_m \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}'} f_m(\mathbf{k}_{\parallel}') \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \times \quad (4.49)$$

$$\times \psi_{m\mathbf{k}_{\parallel}'}^*(\mathbf{r}') \psi_{n\mathbf{k}_{\parallel}}(\mathbf{r}') \psi_{m\mathbf{k}_{\parallel}'}(\mathbf{r}) \psi_{n\mathbf{k}_{\parallel}}^*(\mathbf{r}),$$

где $\psi_{n\mathbf{k}_{\parallel}}(\mathbf{r}) = (1/\sqrt{S}) e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{r}_{\parallel}} \varphi_n(z)$ – волновая функция электрона в n -ой подзоне, $\mathbf{r} = (\mathbf{r}_{\parallel}, z)$, \mathbf{r}_{\parallel} – двумерный вектор в плоскости слоя, S – площадь структуры, z – координата в ортогональном направлении, $\varphi_n(z)$ – одномерная волновая функция электрона в квантовой яме, \mathbf{k}_{\parallel} – двумерный волновой вектор электрона, $f_m(\mathbf{k}_{\parallel})$ – функция распределения электронов по состояниям в m -й подзоне.

Предположим, что все электроны сосредоточены в нижней подзоне ($f_m(\mathbf{k}_{\parallel}) = 0$ при $m \geq 2$), а их распределение по энергиям описывается фермиевской функцией с температурой T_e :

$$f_1(\mathbf{k}_{\parallel}) = \frac{1}{\exp \left[(E_1(\mathbf{k}_{\parallel}) - E_F) / k_B T_e \right] + 1}. \quad (4.50)$$

Тогда выражение (4.49) может быть преобразовано к следующему виду:

$$\Delta E_n^{\text{обмен}}(\mathbf{k}_{\parallel}) = -2\pi \frac{e^2}{\varepsilon} \int \frac{d^2 k_{\parallel}'}{(2\pi)^2} f_1(\mathbf{k}_{\parallel}') \int dz \int dz' \phi_1^*(z') \phi_n(z') \phi_1(z) \phi_n^*(z) \times$$

$$\times \frac{e^{-|\mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{k}_{\parallel}'| |z - z'|}}{|\mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{k}_{\parallel}'|}, n = 1, 2. \quad (4.51)$$

Используем в качестве функций $\phi_1(z)$ и $\phi_2(z)$ волновые функции электрона в квантовой яме с бесконечно высокими стенками и рассчитаем обменные поправки к энергетическому спектру электронов в основной и возбужденной подзонах как для равновесных ($T_e = T_0$), так и для горячих ($T_e > T_0$) электронов, где T_0 – температура решетки. Положим $T_0 = 77$ К. Энергия Ферми E_F , соответствующая заданному значению T_e , может быть найдена из условия нормировки для функции распределения f_1 с учетом обменных поправок $\Delta E_1(\mathbf{k}_{\parallel})$ путем итерационной процедуры. Результаты расчетов для данной структуры представлены на рис. 4.12.

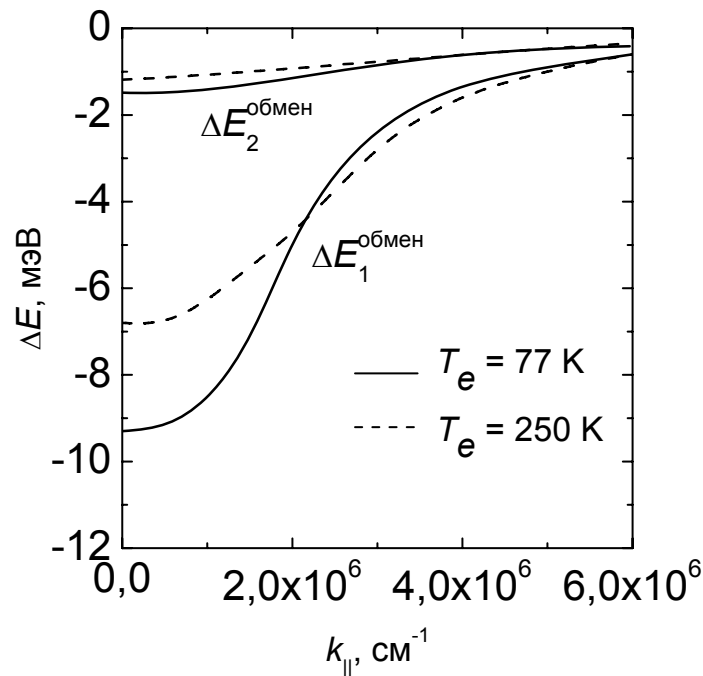


Рис. 4.12. Обменные поправки к энергетическому спектру первой и второй подзон в квантовой яме для равновесных и горячих двумерных электронов. Расчет выполнен при $T_0 = 77$ К

Отметим, что для центра подзон ($k_{\parallel} \approx 0$) обменное взаимодействие сдвигает электронные состояния вниз по шкале энергий, причем для первой подзоны этот сдвиг в несколько раз больше, чем для второй. Как уже указывалось, причиной этого является тот факт, что состояния первой подзоны заполнены, а второй – нет. С повышением температуры электронов обменные поправки для центра подзон уменьшаются из-за перераспределения электронов из центра первой подзоны к ее периферии. Таким образом, при разогреве электронов электрическим полем не только происходит их перераспределение по состояниям в \mathbf{k} -пространстве, но еще и меняется сама энергия этих состояний.

Для полученного энергетического спектра электронов $E_n^0(\mathbf{k}_{\parallel}) + \Delta E_n^{обмен}(\mathbf{k}_{\parallel})$ спектральная кривая поглощения света в области межподзонных переходов электронов из основной подзоны в возбужденную может быть рассчитана следующим образом [5]:

$$\alpha(h\nu) \propto \frac{1}{h\nu} \int d^2 k_{\parallel} |\mathbf{M}|^2 \times \\ \times \delta[E_2^0(\mathbf{k}_{\parallel}) + \Delta E_2^{обмен}(\mathbf{k}_{\parallel}) - E_2^0(\mathbf{k}_{\parallel}) - \Delta E_1^{обмен}(\mathbf{k}_{\parallel}) - h\nu] f_1(\mathbf{k}) [1 - f_2(\mathbf{k})], \quad (4.52)$$

где M – матричный элемент перехода. Подчеркнем, что в (4.52) f_1 и f_2 определяются температурой электронов T_e ; величины M , E_1^0 и E_2^0 определяются температурой решетки T_0 , а $\Delta E_1^{обмен}$ и $\Delta E_2^{обмен}$ зависят от обеих температур.

На рис. 4.13, а представлены результаты расчета формы линии межподзонного поглощения для исследованной структуры в равновесии и в условиях разогрева электронов. Для более удобного сравнения с экспериментом расчетная линия поглощения дополнительно уширена по Лоренцу (величина уширения,

$2\Gamma_0 = 2,7$ мэВ, подобрана в соответствии с экспериментальной кривой равновесного поглощения). Расчетные кривые изображены в относительной шкале $h\nu - h\nu_0$, где $h\nu_0$ – равновесное положение пика межподзонного поглощения. Это позволяет не учитывать деполяризационный сдвиг (который почти не меняется с разогревом электронов). Экспериментальные исследования поглощения в электрическом поле велись для трех энергий кванта, показанных на рисунке стрелками. На рис. 4.13, б приведена схема электронных оптических переходов, объясняющая сдвиг пика поглощения. Как видно, рассмотренная модель дает «красный» сдвиг пика межподзонного поглощения и его уширение при разогреве электронов в электрическом поле.

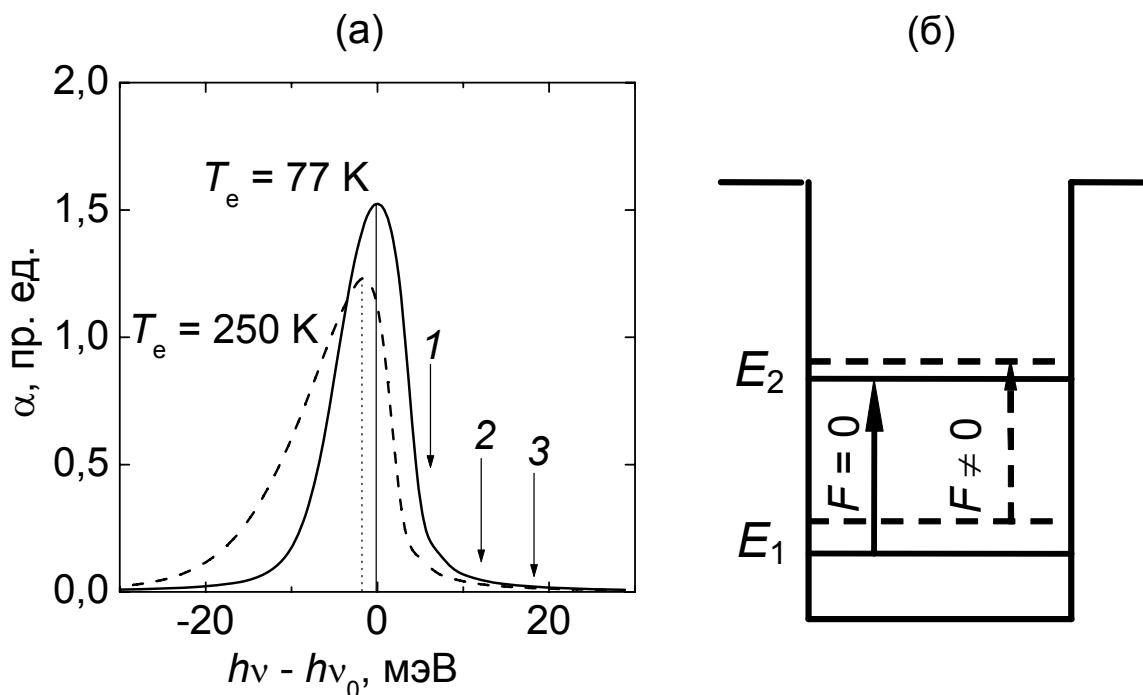


Рис. 4.13, а – сдвиг и уширение линии межподзонного поглощения при разогреве двумерных электронов. Расчет при $T_0 = 77$ К. Стрелки 1, 2, 3 указывают положение линий излучения лазера, для которых была экспериментально исследована электрооптическая модуляция (соответственно, 117, 123 и 129 мэВ); б – переходы электронов в квантовой яме под действием света при $k = 0$

Результаты экспериментов по исследованию изменения коэффициента поглощения света в электрическом поле приведены на рис. 4.14.

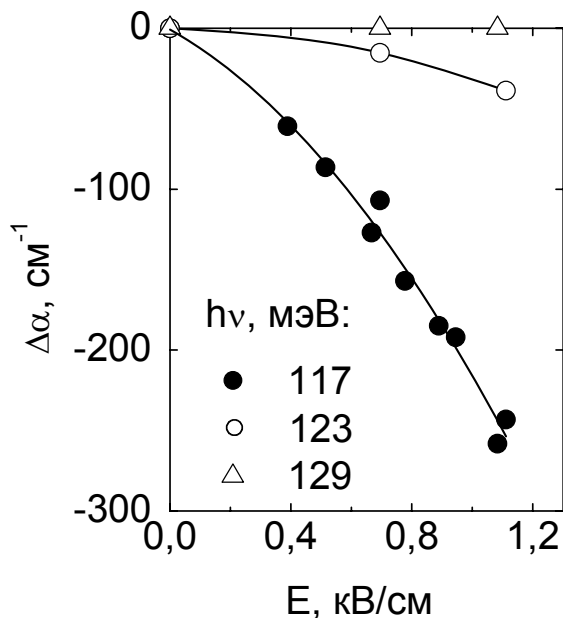


Рис. 4.14. Изменение коэффициента поглощения света при межподзонах переходах электронов в квантовой яме в продольном электрическом поле, измеренное для различных энергий кванта света при температуре решетки $T_0 = 77$ К

В эксперименте было обнаружено ожидавшееся уменьшение коэффициента поглощения света в электрическом поле. Наблюдавшееся «просветление» образца быстро ослабевает по мере удаления рабочей длины волны от вершины пика равновесного поглощения ($h\nu = 111$ мэВ).

Такое поведение поглощения свидетельствует о «красном» сдвиге линии поглощения при разогреве электронов. Сопоставляя наблюдавшееся в эксперименте уменьшение коэффициента поглощения света при $h\nu = 117$ и 123 мэВ с семейством расчетных кривых межподзонах поглощения на горячих электронах, можно получить полевую зависимость температуры горячих электронов.

В частности, для поля $F = 1000$ В/см получаем, что электроны разогреваются до температуры $T_e \approx 250$ К. Это хорошо согласуется с

экспериментальными данными для температуры горячих электронов, полученными для подобных квантовых ям в результате анализа горячей фотолюминесценции (при той же мощности, приходящейся на один электрон) в работе *Ozturk E. et al // Semic. Sci. Technol. – 1994. – Vol. 9. – P. 782–785.*

4.4. НЕЛИНЕЙНАЯ ОПТИКА НАНОСТРУКТУР

В настоящем разделе будут рассмотрены так называемые нелинейные оптические явления в наноструктурах [2]. В качестве введения кратко напомним основные понятия нелинейной оптики.

4.4.1. *Линейная и нелинейная оптика*

Если амплитуда световой волны достаточно велика, то при распространении этой волны в среде могут наблюдаться так называемые *нелинейные оптические явления*:

– оптические параметры среды (коэффициент поглощения и показатель преломления) будут зависеть от интенсивности световой волны;

– частота световой волны может меняться;

– принцип суперпозиции будет нарушен;

– фотоны смогут взаимодействовать с фотонами, то есть распространение излучения в среде может зависеть от воздействия другой световой волны.

Среда, в которой наблюдаются указанные оптические явления, называется *нелинейной оптической средой*. Рассмотрим распространение света в такой среде.

Вектор электрической индукции \mathbf{D}_ω световой волны в среде выражается через напряженность электрического поля \mathbf{E}_ω и поляризацию среды \mathbf{P}_ω следующим образом:

$$\mathbf{D}_\omega = \mathbf{E}_\omega + 4\pi\mathbf{P}_\omega. \quad (4.53)$$

В линейных оптических средах поляризация среды просто пропорциональна напряженности поля. Например, для изотропной среды мы можем записать:

$$\mathbf{P}_\omega = \chi(\omega)\mathbf{E}_\omega; \quad \mathbf{D}_\omega = \varepsilon(\omega)\mathbf{E}_\omega, \quad (4.54)$$

где $\varepsilon = 1 + 4\pi\chi$ – диэлектрическая проницаемость среды, а χ – ее диэлектрическая восприимчивость.

В нелинейных средах пропорциональность поляризации и напряженности поля нарушается. Для таких сред следует учесть члены более высоких порядков в разложении поляризации по напряженности поля:

$$P_{\omega i} = \chi_{ij}E_{\omega j} + \chi_{ijk}^{(2)}E_{\omega j}E_{\omega k} + \chi_{ijkl}^{(3)}E_{\omega j}E_{\omega k}E_{\omega l} + \dots, \quad (4.55)$$

где $\chi_{ijk}^{(2)}$ и $\chi_{ijkl}^{(3)}$ – тензоры нелинейных восприимчивостей, описывающие нелинейные эффекты второго и третьего порядков. В формуле (4.55) латинские индексы принимают значения x, y, z ; по дважды повторяющимся индексам подразумевается суммирование.

В однородной линейной среде распространение света описывается волновым уравнением, которое является следствием уравнений Максвелла и материальных уравнений:

$$\Delta\mathbf{E}_\omega - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{D}_\omega}{\partial t^2} = 0 \quad \text{или} \quad \Delta\mathbf{E}_\omega - \frac{\varepsilon}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}_\omega}{\partial t^2} = 0. \quad (4.56)$$

Для нелинейной среды такое описание уже неприменимо. Если мы выделим в поляризации линейную и нелинейную части

$$\mathbf{P}_\omega = \chi(\omega)\mathbf{E}_\omega + \mathbf{P}_\omega^{HL}, \quad (4.57)$$

то вместо (4.56) следует записать

$$\Delta\mathbf{E}_\omega - \frac{\varepsilon}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}_\omega}{\partial t^2} = \frac{4\pi}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{P}_\omega^{HL}}{\partial t^2}. \quad (4.58)$$

Левая часть уравнения (4.58) является линейной по напряженности электрического поля, а нелинейная правая часть может рассматриваться как источник, возбуждающий в среде поля, отличные от полей падающей волны, то есть имеющие отличные от возбуждающей волны частоты, волновые векторы и так далее.

В отличие от (4.56), уравнение (4.58) не может быть в общем случае решено аналитически, в каждом конкретном случае необходимо развивать соответствующий подход для решения этого уравнения. Наиболее часто используемым подходом является приближение Борна, которое аналогично методу теории возмущений в квантовой механике. Этот подход является итеративным. На первом этапе расчета падающая волна используется для расчета правой части уравнения (4.58), затем из полученного линейного уравнения находится поле \mathbf{E}_ω в среде в первом приближении. Далее полученное поле снова используется для расчета правой части (4.58), и процесс повторяется, пока не будет достигнута необходимая точность.

В некоторых случаях применим иной подход, основанный на соотношении характеристических времен. Физические процессы, протекающие в среде, обычно характеризуются временем релаксации $\tau_{\text{рел}}$. Предположим, что это время превышает характерное время изменения амплитуды электромагнитной волны t_B и ее обратную частоту ω^{-1} :

$$\tau_{\text{рел}} > t_B, \omega^{-1}. \quad (4.59)$$

В этом случае применимо разложение (4.55), и может быть использовано приближение Борна.

Другой предельный случай реализуется, если время релаксации меньше, чем t_B :

$$\omega^{-1} \ll \tau_{\text{рел}} < t_B. \quad (4.60)$$

В этом случае параметры среды успевают «подстраиваться» под изменение амплитуды волны, и нелинейные эффекты определяются зависимостью диэлектрической проницаемости (или показателя преломления n и коэффициента поглощения α) среды не от амплитуды, а от интенсивности световой волны I :

$$n = n(\omega, I), \quad \alpha = \alpha(\omega, I). \quad (4.61)$$

Поскольку $I \propto \mathbf{E}_\omega^2$, уравнение (4.56) будет трансформировано в волновое уравнение для поля \mathbf{E}_ω с диэлектрической проницаемостью $\varepsilon(\mathbf{E}_\omega^2)$, т. е. нелинейная часть будет определяться членом $\varepsilon(\mathbf{E}_\omega^2)$.

Существует много различных механизмов, приводящих к оптической нелинейности в полупроводниках и наноструктурах, однако можно разделить их на две группы в зависимости от того, что происходит при взаимодействии излучения с веществом.

Если энергия кванта света лежит вне полосы поглощения, то при взаимодействии излучения с веществом не происходит реального электронного перехода в возбужденное состояние. Такое взаимодействие является недиссипативным. Тем не менее, такое излучение все же поляризует среду, возбуждая так называемое *виртуальное* состояние. Это состояние является короткоживущим, его существование возможно в силу принципа неопределенности Гейзенберга. В системе, состоящей из световой волны и возбужденного материала, происходит периодическая перекачка

энергии между этими двумя частями. Частота осцилляций определяется расстройкой $\Delta\omega = (E - \hbar\omega)/\hbar$, где E – энергия возбужденного состояния. Если расстройка значительно превышает обратное время релаксации $\tau_{\text{рел}}^{-1}$, то эта ситуация соответствует неравенству (4.59). Нелинейные эффекты в таком случае могут быть относительно невелики, однако характерные времена, определяемые согласно принципу неопределенности величиной $(\Delta\omega)^{-1}$, будут чрезвычайно малы.

Если энергия фотона такова, что происходит его поглощение (например, для межзонных переходов энергия фотона должна превышать ширину запрещенной зоны, либо соответствовать возбуждению экситона), то существует диссипация энергии световой волны, и возникает реальное заполнение возбужденных состояний электронами, поглотившими квант света, либо экситонное возбуждение. Сильное поглощение приводит к значительному заполнению возбужденных уровней, что, в свою очередь, меняет оптические свойства среды. В отличие от первого случая эти изменения определяются только интенсивностью световой волны и соответствуют неравенству (4.60), поскольку время существования неравновесной заселенности возбужденных состояний определяется временем релаксации, которое обычно велико. Изменения оптических характеристик вещества, индуцированные такими процессами, существуют, пока существует само неравновесное заполнение возбужденных уровней; в частности, они могут существовать и после прекращения действия световой волны. В полупроводниках и полупроводниковых наноструктурах такими возбужденными состояниями часто являются экситоны или электронно-дырочные пары, в зависимости от условий возбуждения.

4.4.2. Нелинейные эффекты, связанные с виртуальными возбуждениями

Рассмотрим взаимодействие света с квантовой ямой при условии, что энергия кванта заметно меньше расстояния между основными уровнями размерного квантования электронов и дырок. Поглощение света в этих условиях отсутствует, и, как описывалось в предыдущем разделе, в этом случае мы имеем дело с виртуальными возбуждениями. Поскольку энергия экситона также не превышает ширину запрещенной зоны, в качестве этих возбуждений, в основном, будут выступать экситонные состояния. Для описания возникающих эффектов удобно использовать аналогию между экситоном и атомом водорода. В переменном электрическом поле уровни энергии атома водорода сдвигаются. В отличие от классического эффекта Штарка, который наблюдается в статическом электрическом поле, такое явление называется динамическим эффектом Штарка. Аналогичное явление, наблюдаемое в полупроводниках при возбуждении светом с энергией кванта меньшей, чем энергией возбуждения экситона, называется экситонным оптическим эффектом Штарка. Также как и при изучении статического эффекта Штарка (см. формулу (4.13)), сдвиг основного уровня экситона в электромагнитном поле световой волны может быть оценен во втором порядке теории возмущений. Если пренебречь наличием возбужденных состояний экситона, то сдвиг основного уровня экситона $E_{\text{экс}}$ равен

$$\Delta E_{\text{экс}} = A \frac{|PE_{\omega}|^2}{E_{\text{экс}} - \hbar\omega}, \quad (4.62)$$

где P – оптический матричный элемент межзонного перехода, E_{ω} и $\hbar\omega$ – амплитуда и энергия кванта световой волны. Множитель A определяется параметрами гетероструктуры.

Из (4.62) следует, что при возбуждении светом с $\hbar\omega < E_{\text{экс}}$ сдвиг экситонного уровня положительный, а его величина определяется интенсивностью световой волны.

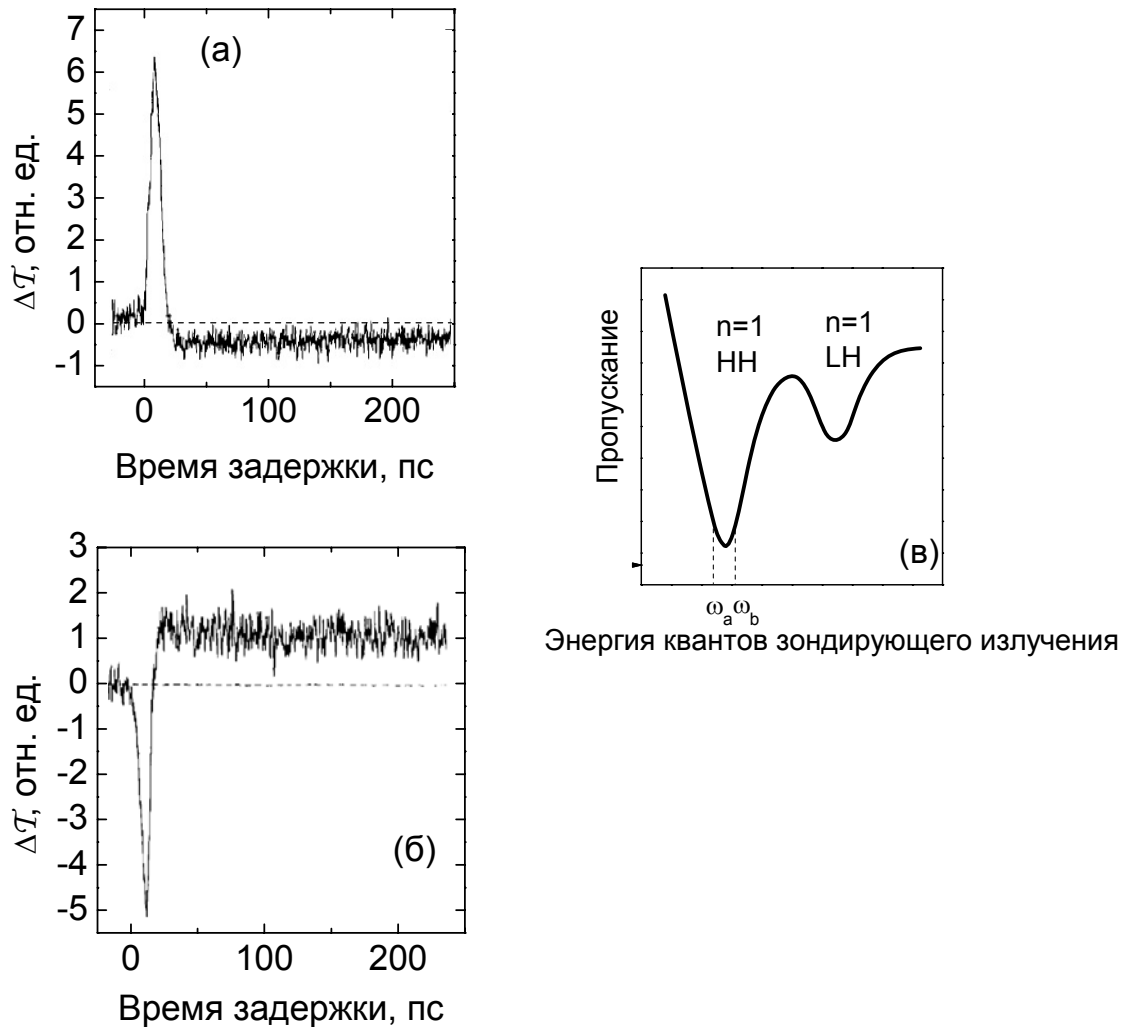


Рис. 4.15. Изменение пропускания ΔT структуры с квантовыми ямами GaAs / AlGaAs как функция сдвига зондирующего импульса от импульса накачки для двух энергий кванта зондирующего излучения.

a – энергия кванта на 1 мэВ меньше, *б* – на 1 мэВ больше энергии экситонного пика, связанного с тяжелыми дырками, *в* – на равновесном спектре пропускания показаны соответствующие энергии квантов зондирующего излучения. $T = 70$ К.

Излучение накачки имеет энергию кванта на 25 мэВ меньше, чем положение экситонного пика, связанного с тяжелыми дырками. Здесь и на рис. 4.16 приведены данные из работы *A. Von Lehmen et al / Optics Letters. – 1986. – Vol. 11. – P. 609–611*

Наблюдать экситонный эффект Штарка можно в следующих условиях. Квантовая яма освещается коротким мощным импульсом излучения (импульсом накачки) с энергией кванта меньшей, чем энергия возбуждения экситона. Возникающие под воздействием этого излучения изменения пропускания структуры в спектральной области экситонного резонанса регистрируются с помощью относительно слабого зондирующего импульса, который может быть задержан относительно импульса накачки. Этот сдвиг не может быть слишком большим, поскольку из-за виртуального характера возбуждения оно сохраняется только во время действия импульса накачки. На рис. 4.15 представлены результаты такого эксперимента для структуры с 65 квантовыми ямами GaAs/Al_{0,27}Ga_{0,73}As (ширина ям равна 9,6 нм, ширина барьеров равна 9,8 нм).

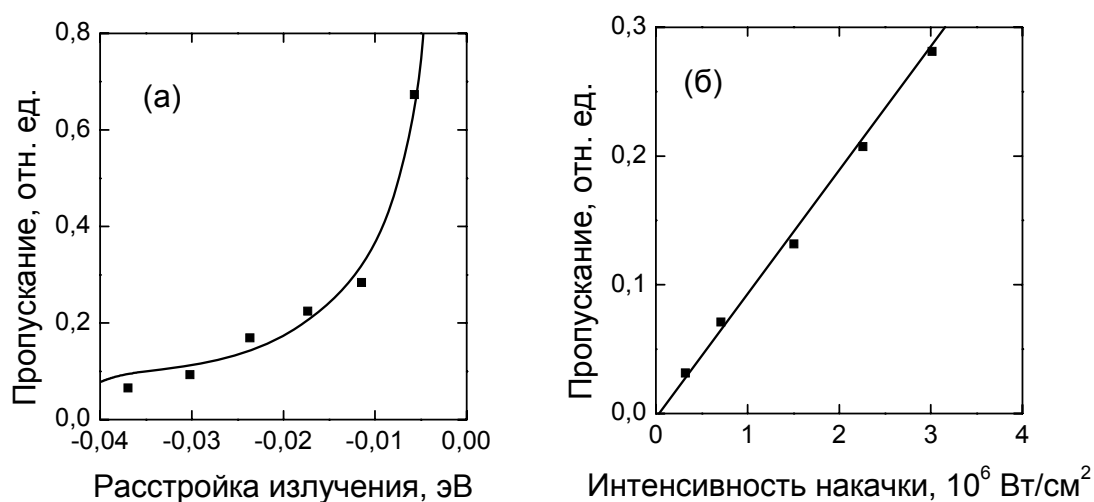


Рис. 4.16. Изменение пропускания в зависимости от расстройки излучения накачки (а) и от интенсивности накачки при фиксированной расстройке 18 мэВ (б)

Зависимости, изображенные на рис. 4.15, содержат узкий пик, ширина которого соответствует времени перекрытия зондирующего импульса и импульса накачки, и долговременную компоненту. Долговременная компонента связана с реальным экситонным поглощением с участием фононов, подобные явления будут описаны ниже. Сейчас нас интересует только быстрая составляющая

изменения пропускания, определяемая виртуальным возбуждением. Противоположные знаки ΔT соответствуют сдвигу экситонного пика в коротковолновую область, подтверждая формулу (4.62). На рис. 4.16 приведены зависимости изменения пропускания от спектральной расстройки излучения накачки $E_{\text{экс}} - \hbar\omega$ и от интенсивности накачки. Согласно (4.62), ΔT должно быть пропорционально интенсивности накачки $I \propto E_{\omega}^2$ и обратной расстройке $(E_{\text{экс}} - \hbar\omega)^{-1}$, что прекрасно подтверждается экспериментальными кривыми.

4.4.3. Нелинейные эффекты при поглощении света

Рассмотрим этот тип нелинейных оптических эффектов в наноструктурах также на примере межзонного поглощения света, при котором возбуждаются либо экситоны, либо электронно-дырочные пары. Такое возбуждение реальных состояний возможно, если энергия кванта возбуждающего излучения лежит выше края поглощения $\hbar\omega > E_{\text{экс}}$.

Перед тем, как рассмотреть возникающие нелинейные эффекты, остановимся на некоторых характерных временах. При возбуждении достаточно коротким импульсом излучения (1 – 10 фс) возникает когерентное возбуждение, представляющее собой суперпозицию основного и возбужденного состояний кристалла. Когерентность волновой функции сохраняется в течение так называемого *времени дефазировки (dephasing time)*, обусловленного, обычно, различными упругими процессами рассеяния. На этом этапе распределение неосновных носителей заряда задается, в основном, спектром импульса накачки. Время дефазировки невелико и в зависимости от различных условий (размерность структуры, экспериментальные условия, наличие флуктуаций и т. д.) может составлять 10 – 1000 фс. Мы не будем интересоваться тем, что происходит на этом этапе, и перейдем к следующему временному интервалу, когда квантовая когерентность уже разрушена, и наблюдается обычное поглощение

света при межзонных переходах электронов. При этом формируются такие распределения неравновесных электронов и дырок по энергиям, при которых центры этих распределений находятся в глубине соответствующих подзон, а их положение соответствует законам сохранения энергии и импульса: $E_c(\mathbf{k}_e) - E_v(\mathbf{k}_h) = \hbar\omega$; $\mathbf{k}_e = \mathbf{k}_h$. После этого начинается обмен энергией и импульсом между носителями заряда, и формируются распределения Ферми с температурой, превышающей температуру решетки. Такое возбуждение может быть названо нетермализованной плазмой; характерные времена ее формирования составляют доли пикосекунды. На следующем этапе включаются более медленные механизмы обмена энергией и импульсом с окружающей средой (решеткой), и температура носителей заряда сравнивается с температурой решетки, плазма становится термализованной. Характерные времена термализации – пикосекунды. Далее следует самый медленный процесс – излучательная или безызлучательная рекомбинация.

Рассмотрим сначала нелинейные эффекты, связанные с термализованной плазмой. В этом случае система находится на этапе рекомбинации, а возбужденные носители заряда и экситоны находятся в квазиравновесных состояниях. Отклонение системы от равновесия характеризуется конечными концентрациями экситонов и электронно-дырочных пар. Оптические параметры системы являются функциями этих концентраций, которые, в свою очередь, определяются интенсивностью излучения. Таким образом, реализуется тип нелинейности, описываемой выражениями (4.61).

Для примера на рис. 4.17 приведены результаты измерения пропускания структуры с квантовыми ямами GaAs / AlGaAs вблизи экситонных резонансов, полученные при различных интенсивностях оптической накачки. Накачка осуществлялась импульсами лазера с длительностью 100 фс и энергией кванта на 60 мэВ превышающей положение экситонного пика, связанного с тяжелыми дырками.

Спектры измерялись через несколько пикосекунд после окончания импульса накачки, так что электронно-дырочная плазма была термализована.

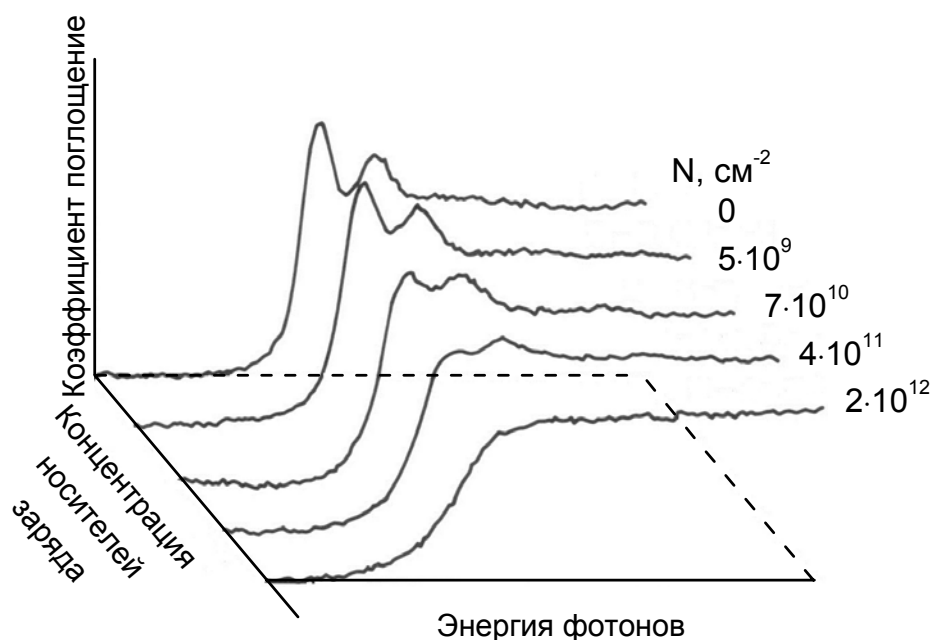


Рис. 4.17. Спектры поглощения структуры с квантовыми ямами GaAs / AlGaAs, измеренные для разной концентрации N неравновесных электронно-дырочных пар. Рис. из книги [14]

Отчетливо видна эволюция спектров с ростом интенсивности накачки и концентрации электронно-дырочных пар: экситонные резонансы, связанные с тяжелыми и легкими дырками, исчезают, и спектр приобретает форму ступеньки, характерную для поглощения в отсутствие кулоновского взаимодействия электрона и дырки, т. е. в отсутствие экситонных эффектов. В [14] также показано, что вид спектров поглощения не зависит от длины волны возбуждения, т. е. от того, каким образом возбуждены неравновесные электроны и дырки.

Наблюдаемые с ростом уровня накачки изменения в спектрах поглощения могут быть объяснены следующим образом.

1. С ростом концентрации электронно-дырочных пар происходит уменьшение энергии электронов и дырок, связанное с многочастичными эффектами, что приводит к уменьшению ширины

запрещенной зоны (*band gap renormalization*). В то же время, энергия экситона практически не меняется в силу его нейтральности. Таким образом, энергия связи экситона, отсчитанная от перенормированного уровня континуума, уменьшается.

2. Вероятность возбуждения экситона уменьшается из-за заполнения состояний, из которых формируется экситон. Это явление аналогично эффекту Бурштейна–Мосса в межзонном поглощении света в легированных полупроводниках.

3. Происходит увеличение столкновительного уширения экситонных пиков.

При низких уровнях возбуждения, когда концентрация неравновесных электронно-дырочных пар невелика, особенности в спектрах, связанные с экситонными резонансами и с переходами в сплошной спектр, разнесены, и на форму спектра поглощения действуют только второй и третий фактор. С увеличением концентрации неравновесных носителей заряда экситонные резонансы разрушаются, что и приводит к ступенчатой форме спектра.

Перейдем к нелинейностям, которые наблюдаются на стадии нетермализованной плазмы, то есть в течение малого времени после импульса возбуждения. Как уже упоминалось, эти времена составляют доли пикосекунды. Напомним, что мы рассматриваем так называемую *pump-probe* методику, в которой производится возбуждение системы мощным импульсом накачки (*pump*) и последующий анализ оптических характеристик с помощью относительно слабого зондирующего излучения (*probe*).

В зависимости от энергии кванта излучения накачки заселение экситонных состояний может создаваться двумя способами: при непосредственном резонансном возбуждении экситона или при возбуждении электронно-дырочных пар в глубине подзон с последующей их релаксацией к дну подзон и формированием связанных (экситонных) состояний. В последнем случае необходимо

учесть влияние экранирования свободными носителями кулоновского взаимодействия, отвечающего за формирование экситона. В обоих случаях влияние импульсного возбуждения на оптические характеристики структуры будет в значительной степени проявляться в просветлении экситонных резонансов, то есть в уменьшении экситонного поглощения.

При резонансном возбуждении экситонов происходит заполнение возможных состояний в фазовом пространстве. При некоторой пороговой концентрации экситонов все возможные состояния оказываются занятыми, и дальнейшее возбуждение экситонов оказывается невозможным – экситонный пик исчезает. Соответствующая пороговая концентрация двумерных экситонов n_{ex} может быть оценена из условия

$$\pi a_{ex}^2 n_{ex} = 1. \quad (4.63)$$

Более точные оценки дают следующее значение для пороговой концентрации [14]:

$$\pi a_{ex}^2 n_{ex} = 0,117. \quad (4.64)$$

Таким образом, при резонансном возбуждении экситонов существует пороговая интенсивность возбуждения $I_{th} \approx n_{ex} / \tau_{ex}$ (τ_{ex} – время жизни экситонов), при превышении которой происходит просветление экситонного поглощения.

При возбуждении электронно-дырочных пар в глубине подзон до начала процесса термализации неравновесных носителей заряда они находятся в глубине подзоны и не могут оказывать влияния на заполнение экситонных состояний. На этом временном интервале носители заряда могут лишь экранировать кулоновский потенциал и тем самым просветлять экситонные резонансы. После термализации электроны и дырки заполняют состояния вблизи дна своих подзон в

соответствии с функцией распределения Ферми. При этом будут образовываться связанные экситонные состояния. Как и в случае резонансного возбуждения, заполнение состояний в фазовом пространстве приведет к уменьшению экситонного поглощения. По сравнению с экранированием заполнение состояний в фазовом пространстве значительно более эффективно. Это является отличительной особенностью описываемых процессов в 2D-системах по сравнению с объемными полупроводниками и связано с ослаблением процессов экранирования в системах с пониженной размерностью [14].

Пороговые концентрации электронно-дырочных пар, соответствующие подавлению экситонного поглощения, также могут быть оценены:

$$\pi a_{ex}^2 n_{eh} = 0,056 \quad \text{для} \quad k_B T \ll R_{ex}^{KЯ}, \quad (4.65)$$

$$\pi a_{ex}^2 n_{eh} = 0,042 \frac{k_B T}{R_{ex}^{KЯ}} \quad \text{для} \quad k_B T \gg R_{ex}^{KЯ}. \quad (4.66)$$

Из сравнения пороговых концентраций (4.64) и (4.65) видно, что «холодная» плазма эффективнее подавляет экситонное поглощение, чем связанные кулоновским взаимодействием электронно-дырочные пары. Как следует из (4.65), «горячая» плазма еще менее эффективно подавляет экситонное поглощение. Это связано с тем, что значительная часть разогретых электронов и дырок имеет значение импульса, превышающее обратный радиус экситона, то есть не может участвовать в образовании экситонов. Другими словами, носители заряда с тепловой энергией $k_B T$, превышающей энергию связи экситона, могут занимать тот же объем, что и экситон, без нарушения принципа Паули.

Полученные результаты могут быть проиллюстрированы диаграммой на рис. 4.18. На ней приведены зависимости,

описываемые формулами (4.64) – (4.66). При возбуждении электронно-дырочных пар в сплошном спектре экситоны могут существовать только в области, лежащей под сплошной кривой, которая имеет два предельных случая – малых и высоких температур электронно-дырочной плазмы. При резонансном возбуждении область существования экситонов расположена под точечной линией.

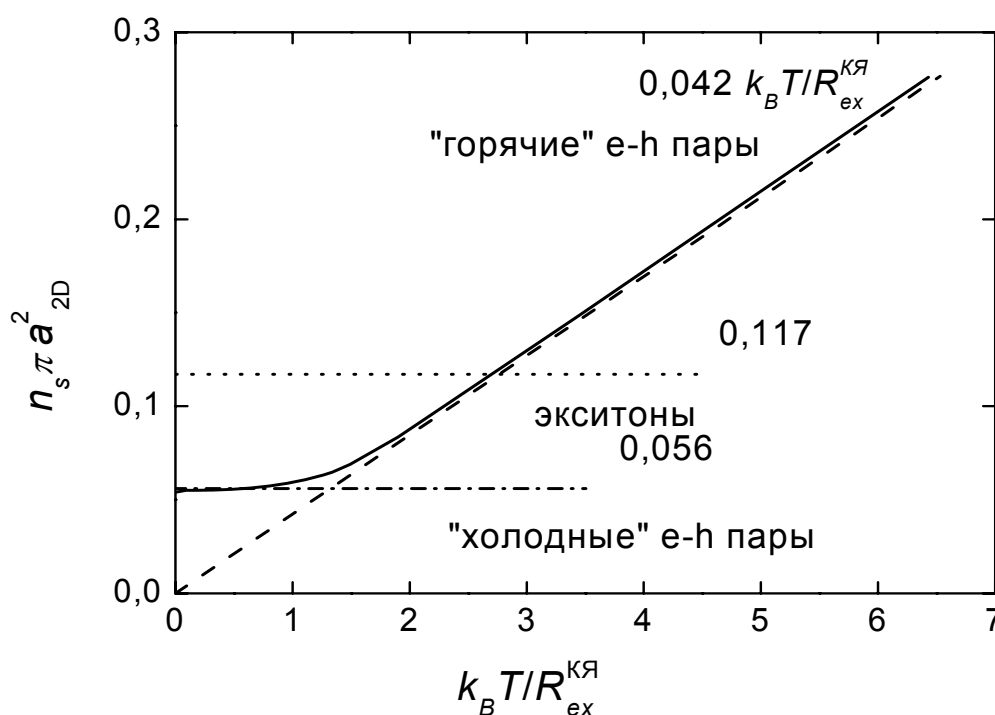


Рис. 4.18. Диаграмма, показывающая области существования экситонного поглощения при возбуждении электронно-дырочных пар в континууме (сплошная кривая) и при резонансном возбуждении экситонов (точечная линия)

Экспериментальные результаты показаны на рис. 4.19, на котором приведена динамика спектров изменения пропускания (*дифференциального пропускания*) структур с квантовыми ямами GaAs / AlGaAs, возбуждаемых импульсами излучения длительностью 100 фс. Спектр возбуждающего излучения также показан на рис. 4.19.

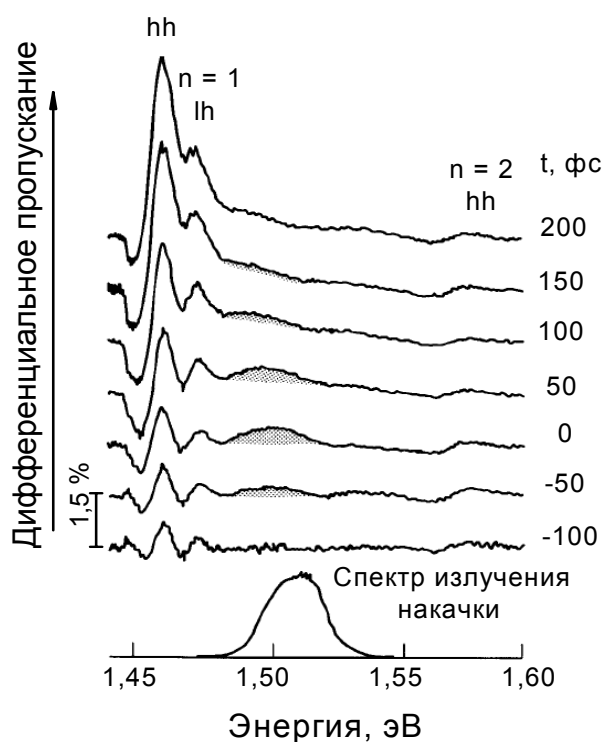


Рис. 4.19. Спектры дифференциального пропускания структуры с квантовыми ямами GaAs / AlGaAs, измеренные с различной задержкой по отношению к импульсу накачки. Снизу показан спектр излучения накачки. $T = 300$ К. Здесь и на рис. 4.18 приведены данные из работы *S.Schmitt-Rink et al / Advances in Physics. – 1989. – Vol. 38. – P. 89.*

Интенсивность излучения накачки соответствует генерации примерно $2 \cdot 10^{10} \text{ см}^{-2}$ электронно-дырочных пар. Непосредственно в момент прихода импульса накачки, как видно из первых кривых рис. 4.18, возникает изменение поглощения на экситонных линиях, связанных с первой и второй подзонами размерного квантования, а также «выжигание» спектрального провала в сплошном спектре, соответствующее генерации неравновесных нетермализованных носителей заряда. Экситонные пики слегка уширяются и просветляются, что связано с действием экранирования кулоновского взаимодействия неравновесными электронами и дырками. Со временем происходит термализация носителей заряда, спектральный провал в континууме расплывается и смещается в область меньших энергий. При этом просветление первого экситонного пика

увеличивается и при сдвиге в 200 фс достигает уровня, характерного для термализованной плазмы (см. рис. 4.17). Увеличения просветления второго экситонного пика со временем не происходит, что, очевидно, связано с тем, что при термализации заполняются только состояния, соответствующие низкоэнергичному пику. На динамику второго пика оказывают влияние только процессы экранирования, которые, как уже указывалось, в квантовых ямах относительно слабы.

4.5. ПРИМЕНЕНИЕ КВАНТОВОРАЗМЕРНЫХ СТРУКТУР В ОПТОЭЛЕКТРОННЫХ ПРИБОРАХ

Понижение размерности электронного газа приводит к ряду новых физических явлений и к существенной модификации известных явлений, наблюдающихся в объемных полупроводниках. С точки зрения приборных применений (в настоящем разделе мы ограничимся оптоэлектронными приборами) это позволяет создавать приборы на принципиально новых эффектах, которые не могут наблюдаться в трехмерном случае, либо существенно улучшить характеристики приборов, основанных на известных эффектах. К последнему случаю относятся, например, инжекционные лазеры на межзонных переходах электронов. Использование квантовых ям или квантовых точек для создания активной области таких лазеров позволило существенно улучшить их характеристики [15]. К приборам, действие которых полностью определяется квантоворазмерными эффектами, можно отнести фотоприемники на межподзонных переходах в квантовых ямах [16].

В настоящем разделе будет рассказано о некоторых оптоэлектронных приборах, действие которых основано на явлении размерного квантования.

4.5.1. Прибор на электрооптическом эффекте с обратной связью

Переход с электрического способа обработки сигналов, который, в основном, используется в современной электронике, на оптический позволил бы существенно повысить скорость обработки информации и создать, например, оптический компьютер, превосходящий существующие устройства. Важным элементом любого компьютера являются бистабильные ячейки, переводимые слабым внешним сигналом из одного устойчивого состояния в другое. Такая бистабильная ячейка с оптическими входом и выходом может быть создана на основе квантоворазмерного эффекта Штарка (см. рис. 4.7) и получила название *self electrooptic effect device (SEED)*.

Схема простейшей конструкции SEED приведена на рис. 4.20, *a* (из работы *D.A.B. Miller et al / Appl. Phys. Lett. – 1984. – Vol. 45. – P. 13*). Основным элементом конструкции является *p-i-n* диод, в *i*-область которого встроена структура с множественными квантовыми ямами GaAs/AlGaAs. Конструкция позволяет освещать структуру внешним излучением, часть которого поглощается структурой, а часть проходит сквозь нее. На диод подается запирающее напряжение U через резистор смещения R .

Рассмотрим принцип действия SEED. Благодаря выбору резистора смещения можно подобрать напряжение на диоде таким образом, чтобы экситонное поглощение было ослаблено из-за квантоворазмерного эффекта Штарка. В соответствии с рис 4.20, *б*, можно выбрать напряжение более 10 В. Таким образом, при малых интенсивностях внешнего излучения имеется слабое поглощение, и сопротивление структуры велико (фототок мал). С ростом интенсивности внешнего излучения из-за генерации электронно-дырочных пар будет расти фототок, сопротивление структуры будет уменьшаться, что приведет к уменьшению падения напряжения на ней – будет расти напряжение на нагрузочном резисторе. Уменьшение смещения на структуре приведет к росту поглощения,

что, в свою очередь, приведет к дальнейшему росту числа неравновесных носителей заряда. Таким образом, в системе имеется положительная обратная связь, которая приведет к скачку – напряжение на структуре уменьшится, а пропускание увеличится. Скорость переключения определяется емкостью структуры и сопротивлением нагрузки, характерные времена могут быть достаточно малы и составлять десятки пикосекунд.

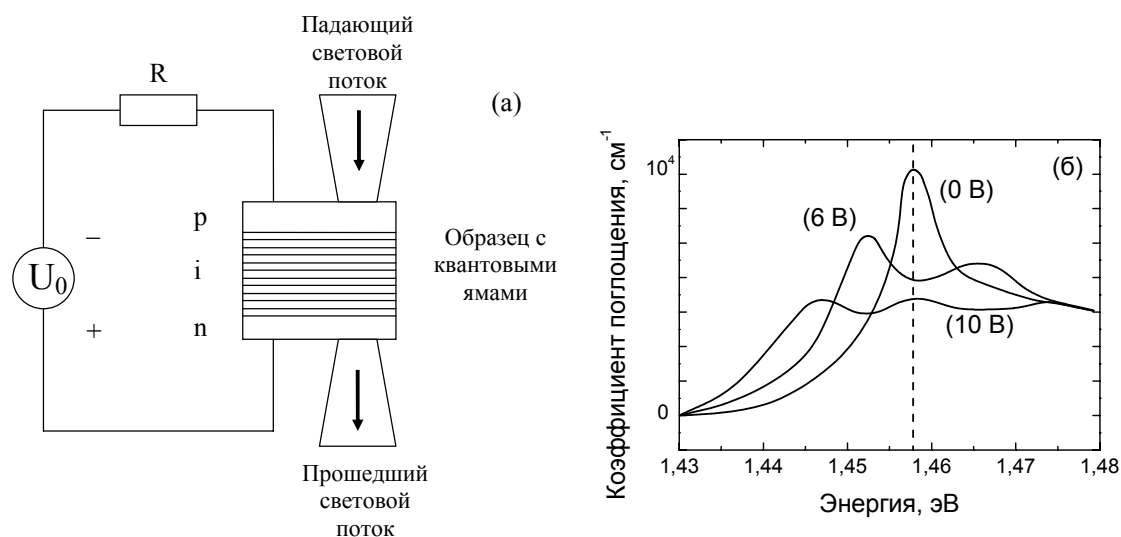


Рис. 4.20. Прибор на электрооптическом эффекте с обратной связью.

a – схематическое устройство SEED на множественных квантовых ямах. *б* – зависимость коэффициента поглощения от энергии кванта для различных смещений на структуре; штриховой линией показана энергия кванта внешнего излучения

Чтобы более детально представить себе переходную характеристику SEED, запишем выражения для тока, протекающего через структуру. С одной стороны, ток определяется нагрузочным сопротивлением:

$$I = \frac{U_0 - U}{R}, \quad (4.67)$$

где U_0 – напряжение питания, U – напряжение на структуре. С другой стороны, ток определяется чувствительностью структуры как фотодетектора S :

$$I = P_{\text{вх}} S(U) + I_{\text{т}}, \quad (4.68)$$

где $P_{\text{вх}}$ – интенсивность падающего света, $I_{\text{т}}$ – темновой ток (ток обратно смещенного p - n перехода, который можно считать малым).

Можно считать, что чувствительность структуры пропорциональна коэффициенту поглощения света: $S(U) \propto \alpha(U)$. Из рис. 4.20, б видно, что если выбрать рабочую энергию кванта так, как показано на рисунке, то зависимость $\alpha(U)$ носит немонотонный характер. Причина этого состоит в наличии в спектре поглощения структуры двух пиков, соответствующих возбуждению экситона, связанного с тяжелой дыркой (пик при меньшей энергии кванта) и с легкой дыркой (пик при большей энергии кванта).

Для нахождения рабочей точки удобно использовать графический метод. На рис. 4.21, а приведены обе зависимости (4.67) и (4.68) для различных интенсивностей падающего света. Как видно из рис. 4.21, а, при увеличении интенсивности падающего излучения $P_{\text{вх}}$ ток через структуру увеличивается, при этом меняется число точек пересечения кривых, то есть число возможных состояний прибора. Для входной интенсивности $P_{\text{вх1}}$ существуют две точки пересечения А и Е, соответственно, имеется два возможных выходных состояния с интенсивностью $P_{\text{выхА}}$ и $P_{\text{выхЕ}}$, причем $P_{\text{выхА}} > P_{\text{выхЕ}}$, поскольку из соотношения $U_{\text{А}} > U_{\text{Е}}$ следует $\alpha(U_{\text{А}}) < \alpha(U_{\text{Е}})$. Если увеличить входную интенсивность излучения до $P_{\text{вх2}}$, то появятся три точки пересечения кривых: В, D и F и три возможных выходных состояния $P_{\text{выхВ}} > P_{\text{выхD}} > P_{\text{выхF}}$. При входной интенсивности $P_{\text{вх3}}$ существуют две точки пересечения С и G и два возможных выходных состояния $P_{\text{выхС}} > P_{\text{выхG}}$.

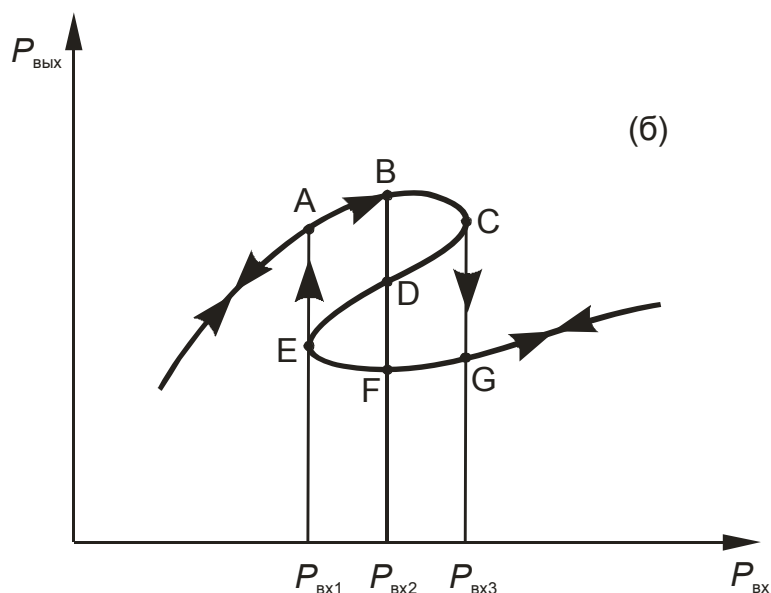
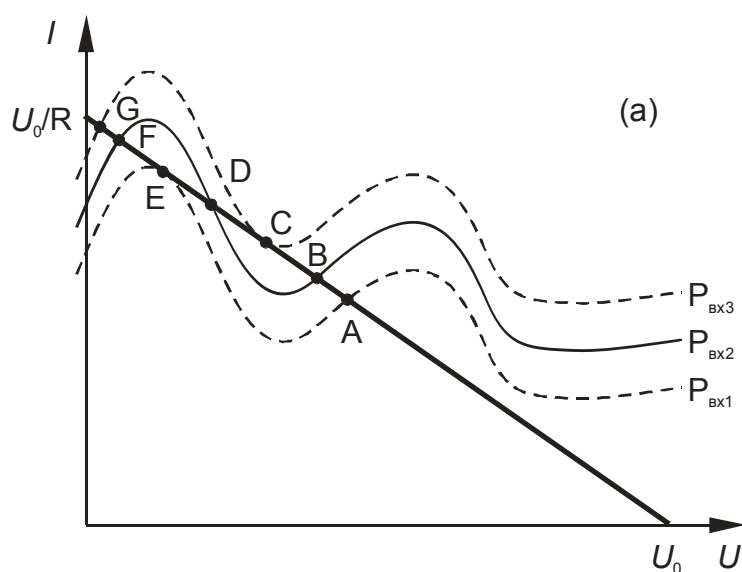


Рис. 4.21. Графическое определение рабочей точки SEED (а); зависимость интенсивности прошедшего излучения от интенсивности света на входе (б). Рис. из книги [16]

Диаграмма переключения прибора при увеличении и уменьшении интенсивности входного излучения приведена на рис. 4.21, б. При малой интенсивности входного излучения $P_{вх} < P_{вх1}$ выходная мощность монотонно растет с ростом входной мощности, ток через структуру мал, и напряжение приложено, в основном, к структуре ($U_A < U < U_0$). При достижении входной мощности $P_{вх3}$

состояние прибора будет описываться точкой С. Если входная мощность превысит $P_{\text{вх}3}$, то единственно возможным станет состояние G, в которое система и перейдет скачком $C \rightarrow G$. При дальнейшем росте входной мощности выходная мощность продолжит свой рост, как это было до точки С. При движении в обратном направлении от большой входной мощности в сторону ее уменьшения система после точки G будет плавно переходить к состояниям F и E. Дальнейшее уменьшение входной мощности $P_{\text{вх}} < P_{\text{вх}1}$ приведет к скачку $E \rightarrow A$, затем выходная мощность продолжит уменьшаться.

Таким образом, описанная структура представляет собой бистабильную систему, полностью управляемую входным оптическим сигналом.

4.5.2. Лазер среднего инфракрасного и терагерцового диапазонов на межподзонных переходах электронов в квантовых ямах (каскадный лазер)

Разработка источников излучения среднего инфракрасного и терагерцового диапазонов (длина волны 4 – 1000 мкм) чрезвычайно важна, поскольку в этом спектральном диапазоне лежат полосы поглощения молекул многих веществ: газов, диэлектриков, органических веществ, биологических объектов. Длина волны излучения «традиционных» полупроводниковых инжекционных лазеров, работающих на межзонных переходах электронов, не превышает 30 мкм; при этом приборы, работающие в диапазоне 4 – 30 мкм, требуют охлаждения до криогенных температур. Сложности с продвижением инжекционных лазеров в длинноволновую область спектра связаны с резким ростом безызлучательной оже-рекомбинации, приводящей к значительному ухудшению параметров лазеров. Инжекционные лазеры с длиной волны излучения, превышающей 30 мкм, в настоящее время отсутствуют. Несомненным успехом явилась разработка квантово-каскадного лазера на межподзонных переходах электронов в квантовых ямах,

созданного в 1994 году сотрудниками AT&T Bell Laboratories (США) и основанного на идеях Р. Ф. Казаринова и Р. А. Суриса, выдвинутых задолго до этого (*Р. Ф. Казаринов, Р. А. Сурис / ФТП. – 1971. – Том 5. – С. 797; ФТП. – 1972. – Том 6. – С. 148*).

Основными свойствами, отличающими каскадные лазеры от инжекционных, являются униполярность (рабочими носителями заряда являются только электроны) и каскадность (электрон, проходящий через структуру, участвует в испускании нескольких квантов света). Весьма важным обстоятельством является также то, что принцип действия каскадного лазера основан на использовании межподзонных переходов электронов в квантовых ямах, что позволяет выбирать рабочую энергию кванта в большом диапазоне, меняя параметры квантовой ямы. Рабочая длина волны инжекционного лазера в значительной степени определяется шириной запрещенной зоны.

Активная область каскадного лазера представляет собой многослойную периодическую структуру, выращенную на подложке. В рабочем режиме к структуре прикладывается поперечное электрическое поле. На рис. 4.22 показано два периода структуры первого каскадного лазера.

Область рабочих переходов образована несколькими туннельно-связанными квантовыми ямами различной ширины (обычно их три, но существуют конструкции и с двумя ямами). Ямы спроектированы таким образом, чтобы обеспечить инверсию населенности между уровнями 3 и 2. Назначение области инжекции состоит в том, чтобы неравновесные электроны, прошедшие через область рабочих переходов, пришли в тепловое равновесие с решеткой (термализовались) и инжектировались на уровень 3 следующего периода. Эта область представляет из себя сверхрешетку с переменным периодом. На рис. 4.22 условно показано дно нижней минизоны, по которой осуществляется проводимость по этой

сверхрешетке. Рассмотрим протекание тока через структуру, изображенную на рис. 4.22.

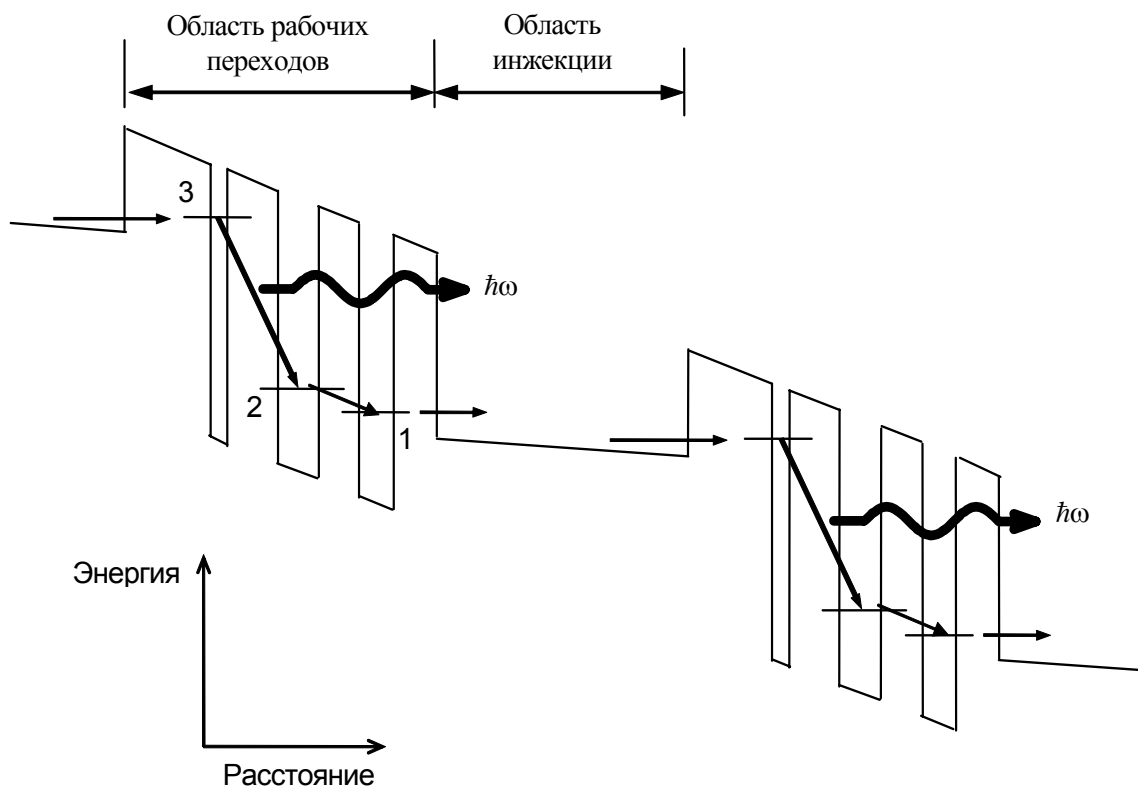


Рис. 4.22. Профиль дна зоны проводимости активного слоя каскадного лазера при приложении поперечного электрического поля (схематически).
Стрелками показаны переходы электронов

Схема переходов между уровнями показана на рис. 4.23. Электроны эффективно инжектируются на уровень 3 из области инжекции и заполняют его благодаря эффекту резонансного туннелирования, поскольку энергетическое положение этого уровня примерно соответствует дну минизоны в области инжекции. Время туннелирования $\tau_{\text{тун}}$ через трапецеидальный барьер мало и составляет порядка 0,2 пс. Волновые функции электронов на уровнях 3 и 2 частично перекрываются, по этой причине возможны переходы электронов между этими уровнями. Самыми эффективными процессами такого рода являются переходы с испусканием оптического фотона. Характерное время такого процесса τ_{32}

составляет 4,3 пс. Это время довольно велико, что определяется особенностью взаимодействия электронов с полярными оптическими фононами. Согласно формуле (4.22), матричный элемент такого взаимодействия обратно пропорционален волновому вектору фонона \mathbf{q} . Как следует из рис. 4.23, при переходе 3→2 с испусканием оптического фонона изменение волнового вектора электрона, равное волновому вектору фонона, довольно значительно, что и определяет относительно большое время τ_{32} .

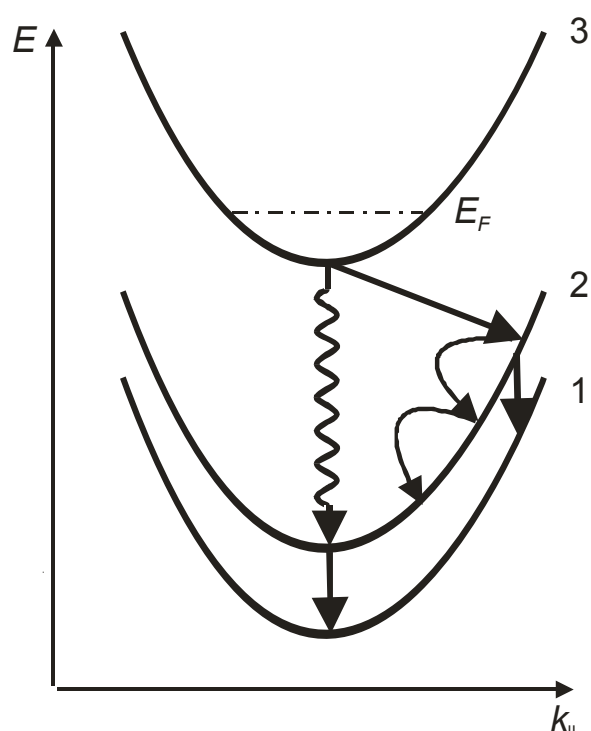


Рис. 4.23. Схема электронных переходов в каскадном лазере. Прямые стрелки показывают переходы с испусканием оптического фонона, волнистая стрелка – оптические переходы с испусканием фотона

Движение электрона с уровня 2 на уровень 1 происходит благодаря тому же процессу – испусканию оптического фонона. Однако параметры квантовых ям подобраны таким образом, чтобы расстояние между этими уровнями было близко к энергии оптического фонона (для GaAs эта величина составляет 36 мэВ). Таким образом, в силу законов сохранения энергии и импульса

переход $2 \rightarrow 1$ идет практически без изменения импульса электрона (на рис. 4.23 этот переход показан вертикальной стрелкой). Вероятность такого процесса велика, и время $\tau_{21} \sim 0,6$ пс, что существенно меньше времени τ_{32} . Таким образом, состояние 2 опустошается быстрее, чем состояние 3, что и обеспечивает возникновение инверсии населенности между этими уровнями – стационарная концентрация электронов на уровне 3 при протекании тока превышает концентрацию на уровне 2. Возникновение инверсии населенности уровней 3 и 2 может быть продемонстрировано, если записать простейшее уравнение для динамики концентрации электронов на уровне 2:

$$\frac{dn_2}{dt} = \frac{n_3}{\tau_{32}} - \frac{n_2}{\tau_{21}} = 0, \quad (4.69)$$

из которого следует, что

$$\frac{n_3}{n_2} = \frac{\tau_{32}}{\tau_{21}} > 1. \quad (4.70)$$

Электроны с уровня 1 туннельным образом переходят в область инжекции. Время туннелирования достаточно мало: $\tau_1 \sim 0,5$ пс. В области инжекции происходит термализация электронов и перемещение к следующему периоду. Затем описанные процессы повторяются.

Итак, стационарные концентрации электронов на уровнях определяются процессами туннелирования и рассеяния с испусканием оптических фононов. При параметрах квантовых ям, выбранных соответствующим образом, возникает инверсия населенности $n_3 > n_2$.

Поскольку между состояниями 3 и 2 возможны оптические переходы, в такой структуре может наблюдаться лазерный эффект. Следует отметить, что эффективность такого лазера будет невелика,

поскольку характерное время $\tau_{\text{изл}}$ оптического перехода $3 \rightarrow 2$ существенно превышает время перехода с испусканием фона: $\tau_{\text{изл}} \sim 13 \text{ нс} \gg \tau_{32}$. Излучательная эффективность перехода $3 \rightarrow 2$ описывается следующим выражением:

$$\eta = \frac{\tau_{32}}{\tau_{\text{изл}}} \cong 3 \cdot 10^{-4}. \quad (4.71)$$

Увеличение общей эффективности лазера достигается за счет каскадного эффекта.

Со времени своего появления в 1994 году и до настоящего времени конструкция и возможности каскадных лазеров претерпели существенные изменения. Как уже упоминалось, используются трехуровневая и двухуровневая схемы области рабочих переходов, кроме этого, разработаны схемы лазеров на сверхрешетках с инверсией населенности между минизонами. Первый каскадный лазер имел длину волны излучения 4,2 мкм, работал в импульсном режиме и требовал охлаждения. К настоящему времени рабочий диапазон длин волн увеличен до 250 мкм, рабочая температура и выходная мощность каскадных лазеров непрерывно повышаются.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Ю П.* Основы физики полупроводников / П. Ю, М. Кардона. – М. : Физматлит, 2002. – 560 с.
2. *Mitin V. V.* Quantum heterostructures: optoelectronics and microelectronics / V. V. Mitin, V. A. Kochelap, M. A. Stroschio. – Cambridge University Press, 1999. – 642 p.
3. *Ландау Л. Д.* Теория упругости / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – М. : Физматлит, 2007. – 264 с.
4. *Ландау Л. Д.* Квантовая механика / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – М. : Физматлит, 2004. – 800 с.
5. *Воробьев Л. Е.* Оптические свойства наноструктур / Л. Е. Воробьев [и др.]. – СПб. : Наука, 2001. – 188 с.
6. *Bastard G.* Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures / G. Bastard. – Les Ulis: Les Editions de Physique, 1988. – 360 p.
7. *Шик А. Я.* Физика низкоразмерных систем / А. Я. Шик [и др.]. – СПб. : Наука, 2001. – 160 с.
8. *Ландау Л. Д.* Статистическая физика. Часть 1 / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – М. : Физматлит, 2005. – 616 с.
9. *Аскеров Б. М.* Электронные явления переноса в полупроводниках / Б. М. Аскеров. – М. : Наука, 1985. – 317 с.
10. *Андо Т.* Электронные свойства двумерных систем / Т. Андо, А. Фаулер, Ф. Стерн. – М. : Мир, 1985. – 416 с.
11. *Singh J.* Physics of Semiconductors and Their Heterostructures / J. Singh. – New York : McGraw-Hill, Inc., 1993. – xxiv, 851 p.
12. *Davies J. H.* The Physics of Low-Dimensional Semiconductors / J. H. Davies. – Cambridge University Press, 1998. – 438 p.
13. *Воробьев Л. Е.* Оптические явления в полупроводниковых квантово-размерных структурах / Л. Е. Воробьев [и др.]. – СПб. : Наука, 2000. – 156 с.

14. *Chemla D. S.* Optical Nonlinearities and Instabilities in Semiconductors / D. S. Chemla [и др.]. – Boston : Academic, 1988. – 440 p.

15. *Жуков А. Е.* Лазеры на основе полупроводниковых наноструктур / А. Е. Жуков – СПб. : Элмор, 2007. – 304 с.

16. *Chuang S. L.* Physics of Photonics Devices / S. L. Chuang. – Hoboken, New Jersey. : John Wiley & Sons, Inc., 2009. – 821 p.

17. *Гасумянц В. Э.* Размерное квантование. Часть 1. Энергетический спектр наноструктур : учеб. пособие / В. Э. Гасумянц [и др.] ; под общ. ред. С. Н. Лыкова. – СПб. : Изд-во Политехн. ун-та, 2008. – 258 с.

Гасумянц Виталий Эдуардович
Лыков Сергей Николаевич
Пшенай-Северин Дмитрий Александрович
Фирсов Дмитрий Анатольевич

РАЗМЕРНОЕ КВАНТОВАНИЕ
Часть 2. ОПТИЧЕСКИЕ И КИНЕТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ НАНОСТРУКТУР

Учебное пособие

Лицензия ЛР № 020593 от 07.08.97
Налоговая льгота — Общероссийский классификатор продукции
ОК 005-93, т. 2; 95 3005 — учебная литература

Подписано в печать 17.12.2010. Формат 60×84/16. Печать цифровая.
Усл. печ. л. 15,25. Уч.-изд. л. 15,25. Тираж 36. Заказ 7338b.

Отпечатано с готового оригинал-макета, представленного авторами,
в Цифровом типографском центре Издательства
Политехнического университета.
195251, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29.
Тел.: (812) 550-40-14
Тел./факс: (812) 297-57-76