

Федеральное агентство по образованию  
САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ  
ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

---

**Приоритетный национальный проект «Образование»  
Инновационная образовательная программа  
Санкт-Петербургского государственного политехнического университета**

***В. Э. ГАСУМЯНЦ Д. А. ФИРСОВ***

## **ЭЛЕКТРОНЫ И ФОНОНЫ В КВАНТОВОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМАХ**

*Рекомендовано Учебно-методическим объединением  
по университетскому политехническому образованию  
в качестве учебного пособия для студентов высших учебных заведений,  
обучающихся по направлению подготовки  
140400 – “Техническая физика”*

Санкт-Петербург  
Издательство Политехнического университета  
2008

УДК 538.915:530.145(075.8)

ББК 22.37я73

Г22

Рецензенты:

Доктор технических наук, профессор СПбГПУ *О. В. Толочко*  
Доктор физико-математических наук, старший научный сотрудник  
ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН *П. Н. Брунков*

*Гасумянц В. Э. Электроны и фононы в квантово-размерных системах : учеб. пособие / В. Э. Гасумянц, Д. А. Фирсов. – СПб. : Изд-во Политехн. ун-та, 2008. – 96 с.*

Содержит сведения о влиянии эффекта размерного квантования на энергетический спектр свободных носителей заряда и фононный спектр кристаллов. Описаны также основы теории электрон-фононного рассеяния различных типов, в которой учтен эффект размерного квантования энергии электрона.

Предназначено для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлению подготовки 140400 «Техническая физика» при изучении дисциплин «Материаловедение и технология конструкционных материалов» и «Физика некристаллических твердых тел». Оно может быть использовано для подготовки студентов по направлению «Электроника и микроэлектроника», а также аспирантами, инженерами и научными работниками, специализирующимися в области опто- и наноэлектроники.

Работа выполнена в рамках реализации Инновационной образовательной программы Санкт-Петербургского государственного политехнического университета «Развитие политехнической системы подготовки кадров в инновационной среде науки и высокотехнологических производств Северо-Западного региона России».

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

© Гасумянц В. Э., Фирсов Д. А., 2008

© Санкт-Петербургский государственный политехнический университет, 2008

ISBN 978-5-7422-2036-7

## ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение .....	5
Глава 1. Структуры с пониженной размерностью .....	8
1.1. Введение .....	8
1.2. Квантовые ямы .....	9
1.2.1. Прямоугольная потенциальная яма с бесконечно высокими стенками .....	10
1.2.2. Симметричная прямоугольная потенциальная яма со стенками конечной высоты .....	14
1.2.3. Несимметричная прямоугольная потенциальная яма .....	19
1.2.4. Потенциальная яма с изменяющимся значением потенциала .....	22
1.2.5. Экспоненциальная потенциальная яма .....	27
1.2.6. Двумерный электронный газ .....	30
1.3. Квантовые нити .....	32
1.4. Квантовые точки .....	35
1.5. Сверхрешетки .....	38
1.5.1. Энергетический спектр периодической сверхрешетки .....	39
1.5.2. Влияние направления движения электрона на его энергетический спектр .....	46
1.5.3. Использование метода матриц переноса .....	48
1.5.3.1. Формализм матриц переноса .....	48
1.5.3.2. Примеры применения метода матриц переноса .....	51
1.6. Плотность электронных состояний в системах с пониженной размерностью .....	58
1.7. Статистика носителей заряда .....	66

Глава 2. Фононы в системах с пониженной размерностью .....	71
2.1. Введение .....	71
2.2. Фононы в объемных кристаллах .....	71
2.3. Фононы в гетероструктурах .....	74
2.3.1. Акустические фононы (длинноволновое приближение) .....	75
2.3.2. Коротковолновые акустические и оптические фононы .....	82
2.4. Электрон-фононное взаимодействие в квантовых ямах ...	85
2.4.1. Рассеяние на деформационном потенциале .....	91
2.4.2. Рассеяние на полярных фононах .....	93
Библиографический список .....	96

## ВВЕДЕНИЕ

Физика низкоразмерных систем – достаточно новое и наиболее интенсивно развивающееся в последние годы направление в физике полупроводников. Широко известно, что в настоящее время структуры с пониженной размерностью (квантовые ямы, квантовые нити, квантовые точки, сверхрешетки) являются не только основным объектом исследований, но и служат основой для создания целого ряда перспективных приборов, основанных на новых физических принципах. В подобных структурах носители заряда оказываются локализованными в одном или нескольких направлениях, что приводит к существенному, а в ряде случаев и кардинальному, изменению их свойств. Причиной этого является эффект размерного квантования, приводящий к перестройке энергетического спектра электронов и дырок, который, в результате, становится дискретным для движения вдоль одного или нескольких направлений. При этом для объяснения происходящих в подобных структурах процессов необходимым является привлечение математического аппарата квантовой механики, играющего решающую роль при описании и анализе свойств низкоразмерных систем. Кроме того, для целей практического применения этих структур и создания на их основе действующих приборов и устройств решающее значение имеет умение заранее рассчитать параметры используемой структуры (используемые материалы, уровень их легирования, геометрические размеры), требуемые для получения необходимого практического эффекта, что также невозможно сделать без детального знания квантовой механики и особенностей ее применения в случае к анализу свойств структур с пониженной размерностью.

Перечисленные выше обстоятельства приводят к необходимости углубления подготовки будущих специалистов в области физики низкоразмерных систем. При этом в сложившейся ситуации крайне важное значение имеет пояснение на конкретных примерах способов

и методов применения квантовомеханической теории к описанию свойств низкоразмерных систем, что должно позволить студентам не только получить необходимые теоретические знания, но и овладеть в требуемом объеме математическим аппаратом, необходимым для разработки приборов и устройств, основанных на использовании эффекта размерного квантования. Это позволит решить задачу повышения уровня фундаментальной теоретической подготовки студентов, что на современном этапе является неременным требованием к уровню знаний выпускников вузов, способных успешно работать в наукоемких областях техники и технологии.

Квантоворазмерные структуры обладают большим количеством уникальных свойств, существенно отличающих их от объемных кристаллов. Описанию этих свойств посвящено огромное количество научных статей, а также ряд учебников и монографий, преимущественно на английском языке. Данное пособие не ставит целью перечислить и описать все эти свойства. В нем рассмотрены только два раздела, связанные с влиянием эффекта размерного квантования на энергетический спектр свободных носителей заряда, с одной стороны, и на фононный спектр – с другой. При этом отличительной особенностью пособия является подробное изложение математического аппарата, используемого в физике квантоворазмерных систем, и наличие примеров решения конкретных физических задач, возникающих как при описании процессов, происходящих в данных системах, так и при проектировании приборов на их основе. Прежде всего, это относится к первой главе пособия, в которой проведены подробные расчеты энергетического спектра носителей заряда в структурах с различной формой ограничивающего потенциала (прямоугольные, треугольные, экспоненциальные потенциальные ямы), являющегося базой для описания любых свойств систем с пониженной размерностью. Рассмотрены также вопросы, связанные с особенностями определения

вида функции плотности состояний и концентрации носителей заряда в структурах пониженной размерности.

Во второй главе пособия описаны отдельные вопросы физики размерного квантования фононов и электрон-фононного рассеяния в наноструктурах. После краткого изложения основных понятий о фононах в твердом теле приводится анализ особенностей, к которым приводит размерное квантование – изменение спектра колебаний решетки, появление новых типов фононных мод, таких как локализованные моды и интерфейсные фононы. Далее излагаются основы теории рассеяния электронов на фононах различных типов, в которой учтено размерное квантование энергии электрона. Результаты приводятся для случая модельной квантовой ямы с бесконечно высокими стенками. Особое внимание уделяется приближению сохранения поперечного квазиимпульса.

# ГЛАВА 1. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР И СТАТИСТИКА НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА В СТРУКТУРАХ С ПОНИЖЕННОЙ РАЗМЕРНОСТЬЮ

## 1.1. ВВЕДЕНИЕ

При описании свойств классических объемных материалов обычно рассматривается квазибесконечный образец, для которого, в силу строгой периодичности кристаллической структуры, удается получить выражения, правильно описывающие его свойства. Однако только учет наличия границы образца приводит к появлению дополнительных эффектов (например, наличие локализованных поверхностных состояний, оказывающих достаточно сильное воздействие на физические свойства, регистрируемые в эксперименте). В то же время, большинство свойств материала оказывается размерно-нечувствительными, что позволяет говорить об удельных параметрах, характеризующих не конкретный образец, а материал, из которого он изготовлен. Все это справедливо, когда все геометрические размеры образца являются макроскопическими. Если уменьшать хотя бы один из его размеров, после достижения определенного предела могут начать проявляться размерные эффекты. Так, при сильном уменьшении толщины пленочного образца  $L$  на регистрируемых значениях его электрофизических параметров может сказаться рассеяние носителей заряда на поверхности. При дальнейшем уменьшении  $L$  могут проявиться и другие размерные эффекты, связанные, например, с приближением значения  $L$  к таким параметрам как радиус экранирования или длина свободного пробега носителей заряда. Однако все эти эффекты могут быть отнесены к классическим размерным эффектам, так как энергетический спектр носителей заряда при этом остается неизменным. Ситуация принципиально изменяется, если размер



образца становится сравнимым с длиной волны де Бройля, характеризующей носителя заряда. При выполнении условия

$$L < \frac{2\pi\hbar}{p}, \quad (1.1)$$

где  $p$  – импульс частицы, происходит существенная трансформация энергетического спектра, что приводит к возникновению принципиально новых, квантово-размерных эффектов. Структуры, в которых наблюдаются эти эффекты, называют квантово-размерными или структурами с пониженной размерностью. Описанию основных особенностей строения их энергетического спектра и посвящена данная глава. При этом в каждом конкретном случае (форма и параметры ограничивающего движение электронов потенциала, параметры носителей заряда, число рассматриваемых квантовых ям и т. д.) для нахождения энергетического спектра необходимо решать ту или иную стандартную квантовомеханическую задачу. Подробное описание используемых при этом методов и принципов может быть найдено в [1–3].

## 1.2. КВАНТОВЫЕ ЯМЫ

Наиболее простым и исторически первым объектом, на котором наблюдаются квантово-размерные эффекты, являются пленки, толщина которых удовлетворяет соотношению (1.1). В этом случае носители заряда (и электроны, и дырки) оказываются ограничены в своем движении в направлении  $z$  границами пленки\*. Следовательно, эта пленка представляет собой потенциальную яму шириной  $L$  и глубиной, равной работе выхода электронов. Другим примером квантово-размерных систем являются МДП-структуры, где движение носителей заряда в приповерхностной области полупроводника ограничено таким же как и выше энергетическим барьером со

---

\* Здесь и далее будем считать, что направление, в котором размерность двумерной системы понижена – это направление  $z$ .

стороны слоя диэлектрика и барьером, появляющимся за счет изгиба зон в полупроводнике при приложении к металлическому электроду напряжения той или иной полярности. В этом случае в зависимости от полярности приложенного напряжения потенциальная яма образуется либо для электронов, либо для дырок. Наконец, наиболее оптимальными для наблюдения квантово-размерных эффектов являются гетероструктуры, в которых слой узкозонного полупроводника с обеих сторон окружен широкозонными полупроводниками. В этом случае в центральной области образуется потенциальная яма (как для электронов, так и для дырок), высота которой определяется разрывами зон при контакте двух полупроводников с различной шириной запрещенной зоны. В этом параграфе мы проанализируем энергетический спектр и вид волновых функций электронов, находящихся в различных по форме квантовых ямах, наиболее часто встречающихся в реальных квантово-размерных структурах.

### ***1.2.1. Прямоугольная потенциальная яма с бесконечно высокими стенками***

Прежде всего, рассмотрим наиболее простой случай – тонкой пленки. Поскольку работа выхода электронов составляет несколько электронвольт, что на два-три порядка выше их средней тепловой энергии, сформированную границами пленки потенциальную яму для носителей заряда можно считать, в первом приближении, бесконечно глубокой. В таком случае для нахождения волновых функций и энергетического спектра необходимо решать уравнение Шредингера вида

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \nabla^2 \psi_n(x, y, z) + U(z) \psi_n(x, y, z) = E_n \psi_n(x, y, z), \quad (1.2)$$

где  $\hbar$  – постоянная Планка,  $m^*$  – эффективная масса электрона,  $U(z)$  – потенциал, действующий на электроны и имеющий вид

$$U(z) = \begin{cases} 0 & \text{при } 0 < z < L \\ \infty & \text{при } z > L, z < 0 \end{cases}$$

$E_n$  – собственные значения энергии электрона,  $\psi_n(x, y, z)$  – его волновые функции, соответствующие различным энергетическим уровням  $E_n$ .

Поскольку в рамках такого подхода электрон не может покинуть пленку, граничными условиями для уравнения (1.2) являются

$$\psi_n(x, y, 0) = 0, \quad \psi_n(x, y, L) = 0. \quad (1.3)$$

Переменные в дифференциальном уравнении (1.2) разделяются ( $\psi_n(x, y, z) = \psi_1(x, y) \cdot \psi_{2n}(z)$ ), при этом решение для  $\psi_1(x, y)$  дает плоскую волну  $\psi_1(x, y) = e^{(ik_x x + ik_y y)}$  и спектр значений энергии  $E_k = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*}$ , где  $k_x, k_y$  – компоненты волнового вектора в плоскости  $(x, y)$ . Для функции  $\psi_2(z)$  получаем уравнение:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 \psi_{2n}(z)}{dz^2} + U(z) \psi_{2n}(z) = (E_n - E_k) \psi_{2n}(z), \quad (1.4)$$

Уравнение (1.4) с граничными условиями вида

$$\psi_{2n}(0) = 0, \quad \psi_{2n}(L) = 0,$$

представляет собой стандартное квантово-механическое уравнение, описывающее электрон в бесконечной одномерной прямоугольной потенциальной яме. Его решение есть

$$\psi_{2n}(z) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin(\pi n z / L), \quad (1.5)$$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^* L^2} n^2, \quad (1.6)$$

где  $n = 1, 2, 3, \dots$  – номер уровня размерного квантования. Используя в формуле (1.6) значения постоянной Планка ( $1,05 \cdot 10^{-34}$  Дж·с),

эффективной массы электрона в зоне проводимости, выраженной через  $m_0$  – массу свободного электрона ( $9,1 \cdot 10^{-31}$  кг), а также размер квантовой ямы  $L$ , выраженный в нанометрах, и ведя отсчет энергии от дна зоны проводимости, мы приходим к следующему выражению для вычисления энергий  $E_n$  в электрон-вольтах:

$$E_n = 0,3737 \cdot \left( \frac{m_0}{m^*} \right) \cdot \left( \frac{n}{L} \right)^2.$$

При  $m^* = 0,1 m_0$  и  $L = 10$  нм получаем для энергий первых четырех уровней размерного квантования значения  $E_1 \approx 0,037$  эВ и  $E_2 \approx 0,148$  эВ.  $E_3 \approx 0,333$  эВ и  $E_4 \approx 0,592$  эВ. Вид волновых функций  $\psi_{2n}(z)$  для электронов, располагающихся на данных уровнях энергий, показан на рис. 1.1а.

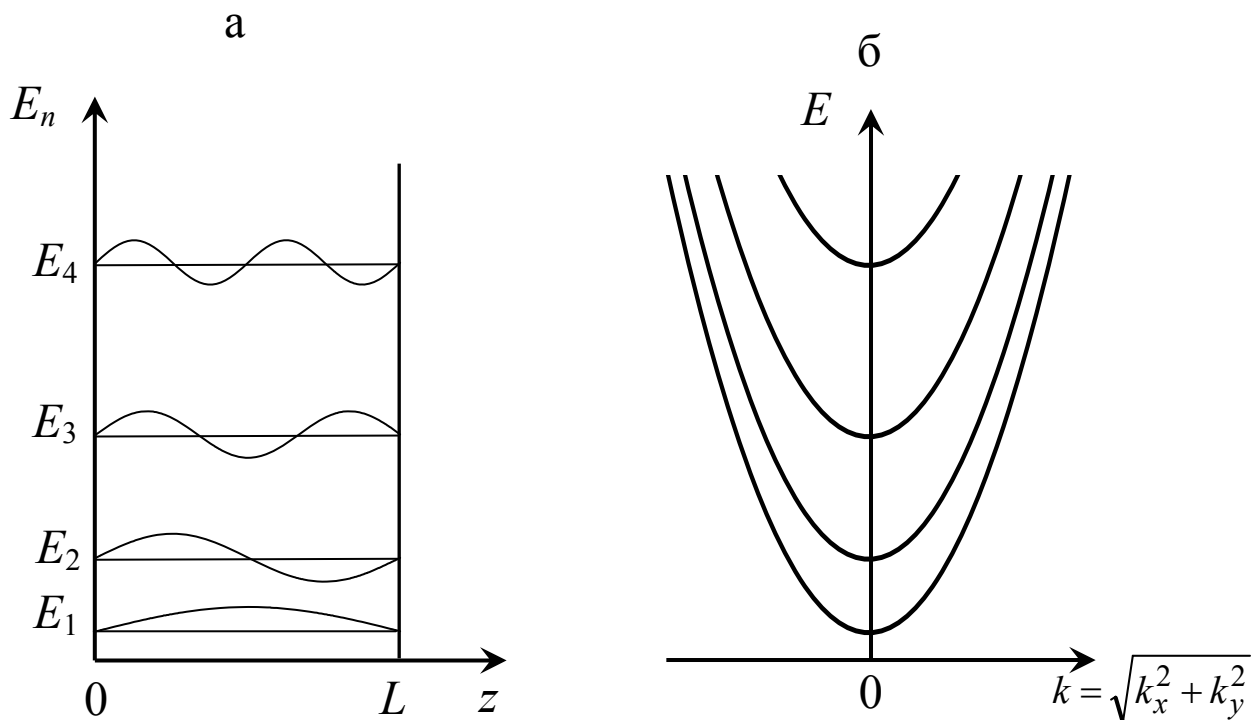


Рис. 1.1. Вид волновых функций на различных энергетических уровнях (а) и энергетический спектр (б) для электронов в бесконечной прямоугольной потенциальной яме

Заметим, что (1.6), естественно, точно совпадают с выражением для уровней энергии электрона в объемном кристалле (для одномерного случая). Принципиальное различие результатов, полученных для объемных кристаллов и тонкой пленки, связано с тем, что положение энергетических уровней сильно зависит (по закону  $E_n \propto L^{-2}$ ) от геометрических размеров рассматриваемого объекта. Для объемного материала расстояние между двумя соседними энергетическими уровнями  $\Delta E_n$  крайне мало ( $\Delta E_n \approx 10^{-14}$  эВ при  $L \approx 1$  см), вследствие чего даже при очень низких температурах тепловая энергия электронов ( $k_B T$ , где  $k_B$  – постоянная Больцмана) на много порядков выше. По этой причине электрон «не чувствует» дискретности энергетического спектра, который в объемных материалах обычно считается квазинепрерывным. При сильном уменьшении размера  $L$  становится возможным выполнение обратного соотношения ( $\Delta E_n > k_B T$ ), в результате чего дискретность энергетического спектра оказывает определяющее влияние на свойства носителей заряда.

Таким образом, при рассмотрении электрона в тонкой пленке его движение оказывается квантованным в направлении  $z$ , но остается непрерывным в плоскости пленки. Полный энергетический спектр электрона есть

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^* L^2} n^2 + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m^*} \quad (1.7)$$

и представляет собой сумму дискретной и непрерывной компонент. В результате полная энергия  $E$  электрона, находящегося на дискретном уровне размерного квантования  $E_n$  (рис. 1.1а), может изменяться в диапазоне  $E = E_n \div \infty$  за счет его движения в плоскости  $(x, y)$ . Таким образом, энергетический спектр электронов в тонкой пленке представляет собой совокупность подзон размерного квантования (см. рис. 1.1б), в пределах каждой из которых энергия может изменяться квазинепрерывным образом.

### **1.2.2. Симметричная прямоугольная потенциальная яма со стенками конечной высоты**

Наиболее перспективными объектами с точки зрения наблюдения квантово-размерных эффектов являются гетероструктуры. В них квантовая яма формируется в тонком (удовлетворяющем условию (1.1)) слое узкозонного полупроводника, выращенного между двумя слоями широкозонного полупроводника. В этом случае высота потенциальной ямы  $W$  определяется разрывами зон ( $\Delta E_c$  или  $\Delta E_v$  для электронов и дырок, соответственно) и является конечной величиной (для типичных гетероструктур  $\Delta E \approx 0,2 \div 0,3$  эВ). Для таких структур приближение бесконечно глубокой потенциальной ямы перестает работать, и для нахождения энергии и волновых функций электрона необходимо решать уравнение (1.2) с потенциалом:

$$U(z) = \begin{cases} 0 & \text{при } 0 < z < L \\ W & \text{при } z > L, z < 0 \end{cases} \quad (1.8)$$

и граничными условиями вида:

$$\psi_n(x, y, z \rightarrow \pm\infty) = 0, \quad (1.9)$$

поскольку вероятность обнаружить частицу в подбарьерной области в этом случае хотя и существует, но быстро спадает при изменении значения координаты в области вне квантовой ямы. Как и для бесконечной прямоугольной потенциальной ямы, переменные в уравнении (1.2) разделяются, и для нахождения энергетического спектра необходимо решать одномерное уравнение Шредингера (1.4) с потенциалом (1.8) и граничными условиями (1.9). При этом полная энергия электронов определяется выражением  $E = E_n + E_k$ , где, как и в предыдущем случае, дискретные уровни  $E_n$  определяются решением уравнения (1.4), а  $E_k$  – непрерывная часть энергетического спектра, определяемая вкладом движения электрона в плоскости

$(x, y)$ . Таким образом очевидно, что в такой яме также должны образовываться подзоны размерного квантования.

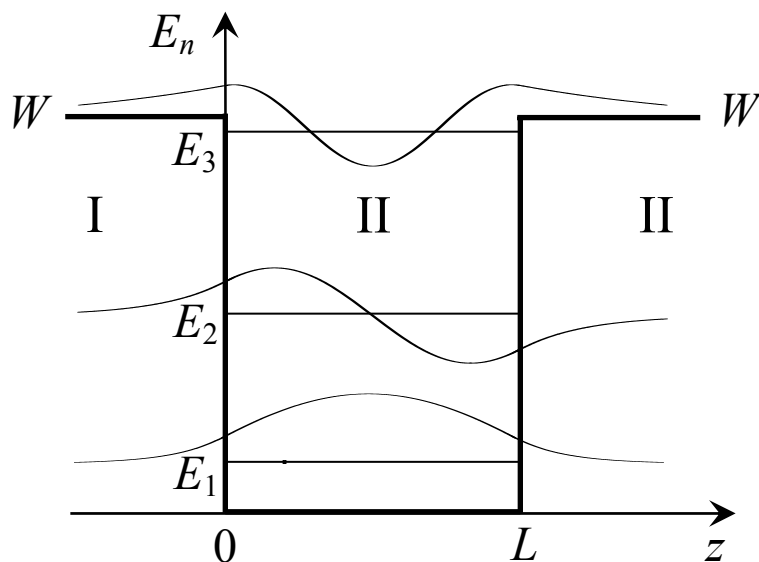


Рис. 1.2. Вид потенциала, положение энергетических уровней и волновые функции электрона в симметричной прямоугольной потенциальной яме с конечными стенками и параметрами

$$m^* = 0,067m_0, W = 0,25 \text{ эВ}, L = 100 \text{ \AA}$$

Разбивая все пространство на три области, отличающиеся значением потенциала (см. рис. 1.2), и учитывая граничные условия (1.9), получаем решения уравнения Шредингера в следующем виде:

$$\begin{aligned} \text{I} \quad (z < 0) \quad \psi_1 &= Ae^{\beta z}, \\ \text{II} \quad (0 \leq z \leq L) \quad \psi_2 &= B \sin(\alpha z + \delta), \\ \text{III} \quad (z > L) \quad \psi_3 &= Ce^{-\beta z}, \end{aligned} \quad (1.10)$$

где  $\alpha = \sqrt{2m^* E_n} / \hbar$ ,  $\beta = \sqrt{2m^* (W - E_n)} / \hbar$ . Для нахождения общего решения необходимо использовать стандартное условие сшивки волновых функций – на границе различных областей значения как самих волновых функций, так и их производных должны совпадать:

$$\psi_1(0) = \psi_2(0), \psi_2(L) = \psi_3(L), \psi'_1(0) = \psi'_2(0), \psi'_2(L) = \psi'_3(L). \quad (1.11)$$

Заметим, что в реальных гетероструктурах значения эффективной массы в области узкозонного (область потенциальной ямы, II)  $m_W^*$  и широкозонного (области барьера, I и III)  $m_B^*$  полупроводников различаются, при этом в большинстве случаев  $m_W^* < m_B^*$ . Это приводит к необходимости изменения условий сшивки, поскольку, строго говоря, на границе должна быть непрерывной не производная волновой функции, а поток вероятности  $j = -\frac{i\hbar}{2m^*}(\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*)$ . Вследствие этого два последних условия в (1.11) трансформируются к виду:

$$m_W^* \psi'_1(0) = m_B^* \psi'_2(0) \text{ и } m_B^* \psi'_2(L) = m_W^* \psi'_3(L).$$

В нашем рассмотрении мы пока будем считать, что эффективные массы в различных пространственных областях совпадают, и только качественно обсудим влияние их различия. Обобщение полученного в данном разделе результата на случай разных значений эффективных масс будет приведено в п. 1.5.3.2.

Подставляя волновые функции (1.10) в условия сшивки (1.11) и исключая значения коэффициентов  $A, B, C$ , получаем два уравнения:

$$\text{tg} \delta = \alpha / \beta, \quad \text{tg}(\alpha L + \delta) = -\alpha / \beta \quad (1.12a)$$

или, воспользовавшись тригонометрическими преобразованиями

$$\sin \delta = \hbar k / \sqrt{2m^* W}, \quad \sin(k\alpha + \delta) = -\hbar k / \sqrt{2m^* W}. \quad (1.12b)$$

Исключая из этих уравнений  $\delta$ , окончательно получаем

$$\alpha L = n\pi - 2 \arcsin\left(\frac{\hbar \alpha}{\sqrt{2m^* W}}\right), \quad (1.13)$$

при этом необходимо учитывать, что поскольку согласно (1.12)  $\text{tg} \alpha > 0$  и  $\sin \delta > 0$ , аргумент арксинуса следует брать только из первой четверти. Уравнение (1.13) определяет положение уровней размерного квантования в рассматриваемой квантовой яме, поскольку



$\alpha L = \alpha L(E_n)$ . В принципе, уравнение (1.13) может быть решено численными методами. Однако значения  $E_n$  при известных параметрах ямы ( $L$  и  $W$ ) и эффективной массе электронов могут быть найдены графически как энергии, соответствующие точкам пересечения зависимостей левой и правой частей (1.13) от  $\frac{\hbar\alpha}{\sqrt{2m^*W}}$ .

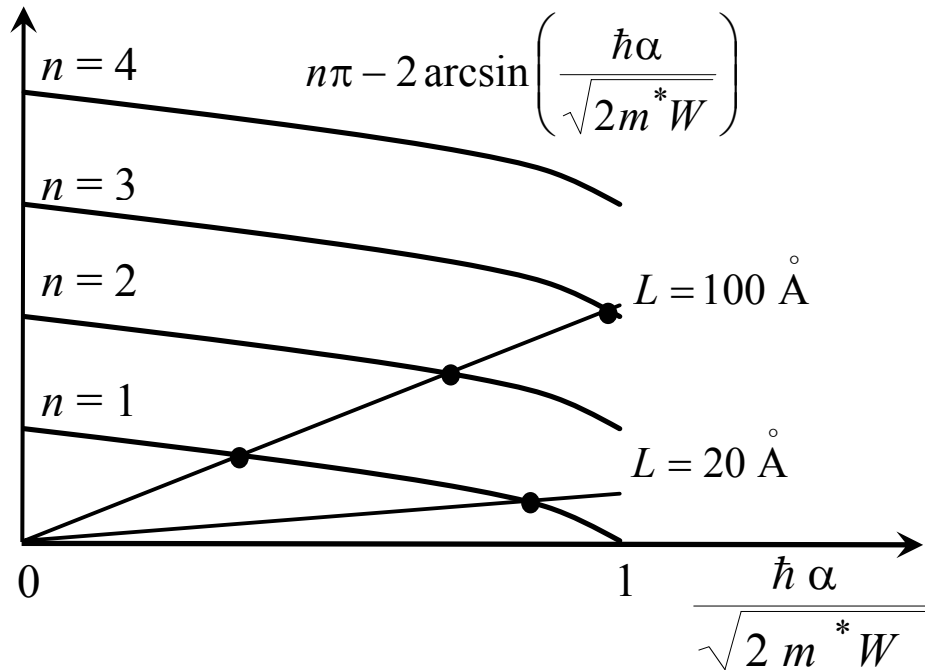


Рис. 1.3. Графическое решение уравнения (1.13) для электронов с массой  $m^* = 0,067m_0$ , находящихся в квантовой яме высотой  $W = 0,25$  эВ и шириной  $20 \text{ \AA}$  и  $10 \text{ \AA}$

Графическое решение уравнения (1.13) для ямы высотой  $W = 0,25$  эВ и случая  $m^* = 0,067m_0$  приведено на рис. 1.3. График правой части (1.13) представляет собой бесконечный набор кривых, соответствующих различным значениям  $n$ . Ясно, что чем выше будет значение параметра  $WL^2$ , тем большим будет наклон прямой, соответствующей левой части (1.13), и, соответственно, увеличится число корней уравнения (1.13), т. е. в квантовой яме будет образовываться большее количество уровней  $n$ . Нижняя прямая на рис. 1.3 соответствует  $L = 20 \text{ \AA}$ , в этом случае в яме образуется только

один уровень размерного квантования с энергией  $E_1 = 0,177$  эВ. Верхняя прямая построена для  $L = 100 \text{ \AA}$ , в таком случае в яме появляется уже три уровня с энергиями  $E_1 = 0,033$  эВ,  $E_2 = 0,126$  эВ и  $E_3 = 0,239$  эВ. Эти уровни энергии и соответствующие им волновые функции, рассчитанные по (1.13), (1.10), приведены на рис. 1.2. Как и следует из пространственной симметрии рассматриваемой задачи, волновые функции являются симметричными относительно середины квантовой ямы. Заметим, что поскольку значение  $E_3$  в рассматриваемом примере очень близко к  $W$ , волновая функция электрона на этом уровне имеет большие «хвосты» в области потенциального барьера, т. е. состояние электрона близко к делокализованному.

Проанализируем условие появления в яме уровня с номером  $n$ . Правая часть (1.13) является монотонно падающей функцией  $\alpha L$ , а левая – растущей. Следовательно, для появления  $n$ -го уровня в яме (т. е. наличия квантованного уровня при энергии  $E_n = W$ ) необходимо выполнение условия

$$\sqrt{2m^*W/\hbar} \cdot L \geq n\pi - 2 \arcsin \frac{\hbar \sqrt{2m^*W/\hbar}}{\sqrt{2m^*W}} = n\pi - \pi. \quad (1.14)$$

Таким образом, при изменении параметров квантовой ямы количество уровней размерного квантования в ней определяется условием:

$$n \leq \frac{\pi L}{\hbar} \sqrt{2m^*W} + 1 \quad (1.15)$$

Отсюда следует очень важное следствие – в симметричной прямоугольной потенциальной яме **всегда имеется хотя бы один уровень размерного квантования**. Другим важным следствием полученных формул является следующее. Ясно, что изменение параметров ямы определяет значение параметра  $\alpha L$  в (1.13), при котором данное уравнение имеет решение. Это означает, что для рассматриваемого случая, как и для бесконечной прямоугольной

потенциальной ямы (см. (1.6)), положение уровней размерного квантования зависит от ширины потенциальной ямы по закону  $E_n \propto L^{-2}$ . Этот вывод является общим для квантовых ям любой формы, более того, порядковая оценка энергий квантованных уровней по формуле  $E_n \approx \hbar^2/m^*L^2$  также является верной для всех случаев.

В заключение кратко рассмотрим влияние различия в значениях эффективной массы в области квантовой ямы и барьера. В этом случае коэффициенты в уравнении Шредингера для областей I, III, с одной стороны, и II – с другой, и, соответственно, значения параметров  $\alpha$  и  $\beta$  в (1.10) изменяются. Действуя аналогично изложенному выше, легко получить вместо уравнения (1.13) окончательное решение в виде:

$$\sqrt{2m_W^*E_n}/\hbar = n\pi - 2 \arcsin \left( \frac{\sqrt{2m_B^*E_n}}{\sqrt{2m_W^*(W - E_n) + \sqrt{2m_B^*E_n}}} \right) \quad (1.16)$$

Как и в случае уравнения (1.13), это уравнение должно решаться численно. Качественные различия от случая  $m_W^* = m_B^*$  заключаются в следующем. Во-первых, при увеличении отношения  $m_B^*/m_W^*$  количество уровней в яме уменьшается, во-вторых, они располагаются выше по энергии.

### ***1.2.3. Несимметричная прямоугольная потенциальная яма***

Зачастую в реальных гетероструктурах слой узкозонного полупроводника зарастивается двумя широкозонными полупроводниками с отличающимися значениями ширины запрещенной зоны, что приводит к различным значениям разрывов зон на левой и правой границах сформированной квантовой ямы. В результате, такая яма будет являться несимметричной, особенности энергетического спектра электронов в ней мы и проанализируем в данном разделе.

Поскольку движение электрона в плоскости  $(x, y)$ , как и в предыдущих случаях, остается свободным, рассмотрим сразу решение уравнения Шредингера для  $z$ -компоненты волновой функции. Для квантовой ямы, показанной на рис. 1.4, оно будет выглядеть аналогично решению (1.10), но с различными значениями коэффициентов  $\beta_1$  и  $\beta_2$  в областях I и III:

$$\begin{aligned}
 \text{I} \quad (z < 0) \quad \psi_1 &= Ae^{\beta_1 z}, \\
 \text{II} \quad (0 \leq z \leq L) \quad \psi_2 &= B \sin(\alpha z + \delta), \\
 \text{III} \quad (z > L) \quad \psi_3 &= Ce^{-\beta_2 z},
 \end{aligned}
 \tag{1.17}$$

где  $\alpha = \sqrt{2m^* E_n} / \hbar$ ,  $\beta_1 = \sqrt{2m^* (W_1 - E_n)} / \hbar$ ,  $\beta_2 = \sqrt{2m^* (W_2 - E_n)} / \hbar$ .

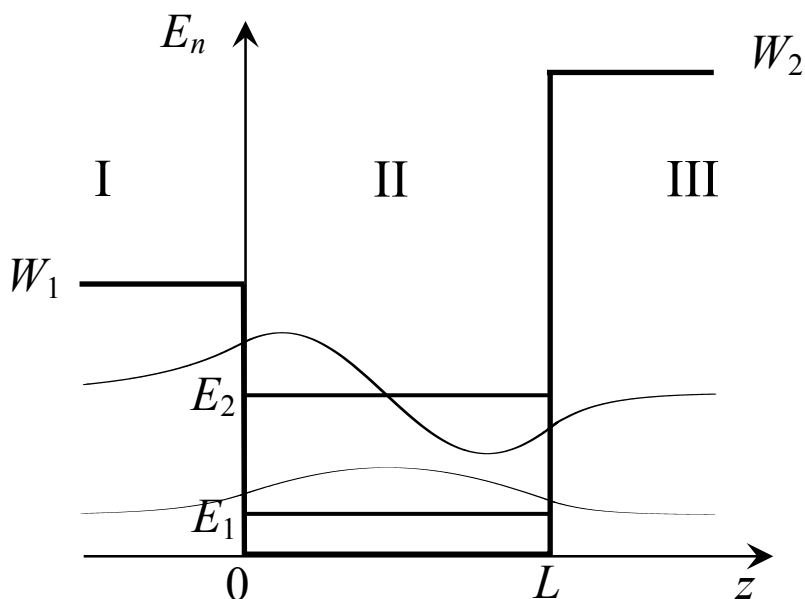


Рис. 1.4. Вид потенциала, положение энергетических уровней и волновые функции электрона в несимметричной прямоугольной потенциальной яме с конечными стенками и параметрами  $m^* = 0,067m_0$ ,  $W_1 = 0,2$  эВ,  $W_2 = 0,4$  эВ,  $L = 100$  Å

Используя те же, что и выше, условия сшивки (1.11) и действуя

аналогично п. 1.1.2, получаем:

$$\sin \delta = \hbar\alpha / \sqrt{2m^*W_1}, \quad \sin(\alpha L + \delta) = -\hbar\alpha / \sqrt{2m^*W_2},$$

откуда находим уравнение для определения уровней энергии:

$$\alpha L = n\pi - \arcsin\left(\frac{\hbar\alpha L}{\sqrt{2m^*W_1L^2}}\right) - \arcsin\left(\frac{\hbar\alpha L}{\sqrt{2m^*W_2L^2}}\right). \quad (1.18)$$

Для квантовой ямы с параметрами  $m^* = 0,067m_0$ ,  $W_1 = 0,2$  эВ,  $W_2 = 0,4$  эВ и  $L = 100 \text{ \AA}$  расчет по (1.18) дает два уровня размерного квантования с энергиями  $E_1 = 0,034$  эВ и  $E_2 = 0,131$  эВ (графическое решение уравнения (1.18) при указанных параметрах приведено на рис. 1.5). Эти уровни и соответствующие им волновые функции (1.17) показаны на рис. 1.4. Видно, что максимум волновой функции, соответствующей уровню для  $E_1$ , смещается от центра ямы в сторону барьера меньшей высоты  $W_1$ , а вероятность проникновения электрона с уровней  $E_1$  и  $E_2$  под этот барьер, как и следовало ожидать, выше, чем под барьер большей высоты  $W_2$ .

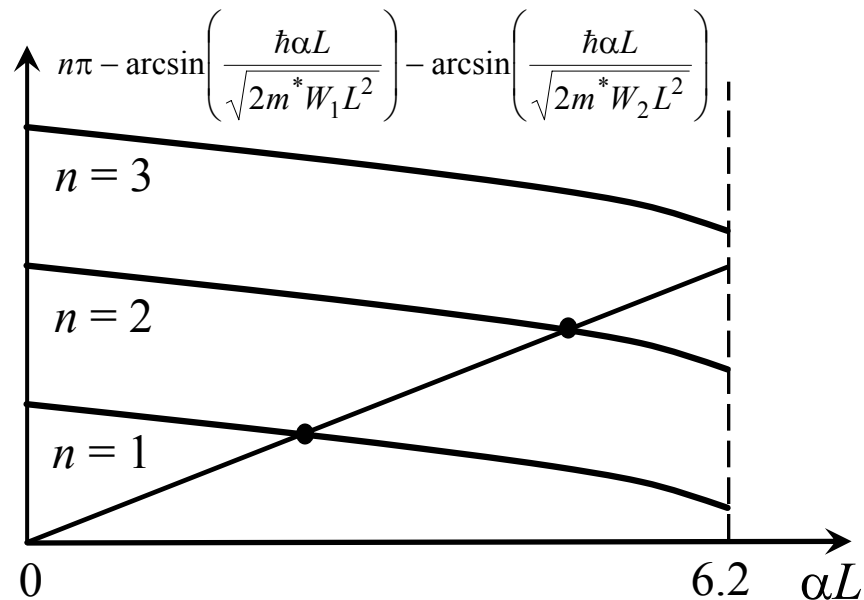


Рис. 1.5. Графическое решение уравнения (1.18) для электронов с массой  $m^* = 0,067m_0$ , находящихся в квантовой яме высотой  $W_1 = 0,2$  эВ,  $W_2 = 0,4$  эВ и шириной  $L = 100 \text{ \AA}$

Рассуждая аналогично п. 1.2.2, получаем условие существования  $n$ -го уровня размерного квантования (т. е.  $E_n = W_1$ ) в несимметричной прямоугольной яме в виде:

$$\sqrt{2m^*W_1}/\hbar \cdot L \geq n\pi - \frac{\pi}{2} - \arcsin \sqrt{\frac{W_1}{W_2}}. \quad (1.19)$$

Видно, что при  $W_1 = W_2$  условие (1.19), как и следовало ожидать, переходит в (1.14). Однако имеется и принципиальное отличие от случая симметричной потенциальной ямы. Из (1.19) следует, что для появления первого уровня размерного квантования ( $n = 1$ ) в несимметричной яме требуется выполнение условия:

$$L\sqrt{2m^*W_1}/\hbar \geq \frac{\pi}{2} - \arcsin \sqrt{\frac{W_1}{W_2}}.$$

Ясно, что для любых  $W_1 \neq W_2$  всегда найдется столь малое значение ширины ямы  $L$ , что это условие не будет выполняться, т. е. **даже один уровень размерного квантования в яме будет отсутствовать**. Этот вывод следует и из рис. 1.5, где видно, что в силу ограниченности единицей возможных значений аргументов арксинуса в правой части уравнения (1.18), даже для  $n = 1$  будут существовать такие малые значения  $L$ , что графики левой и правой частей (1.18) не будут иметь точек пересечения. Таким образом, в отличие от симметричной прямоугольной потенциальной ямы в квантовой яме с различной высотой барьеров связанные состояния имеются не всегда. Условие их появления зависит как от геометрических, так и от энергетических параметров конкретной квантовой ямы.

#### **1.2.4. Потенциальная яма с изменяющимся значением потенциала**

Достаточно часто в реальных квантово-размерных структурах для управления энергетическим спектром и концентрацией носителей

заряда используются различные внешние воздействия, прежде всего, электрическое поле  $F$ . Приложение этого поля вдоль оси  $z$  приводит к модификации потенциала, действующего на находящиеся в яме электроны (рис. 1.6). В этом случае уравнение Шредингера для  $z$ -компоненты волновой функции принимает вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 \psi_n(z)}{dz^2} + U_0(z) \psi_n(z) + W_0 z \psi_n(z) = (E_n - E_k) \psi_n(z), \quad (1.20)$$

где  $U_0(z)$  – потенциал прямоугольной потенциальной ямы (рис. 1.2),  $W_0$  – изменение потенциала на длине ямы, а условия сшивки волновых функций остаются неизменными (см. (1.11)).

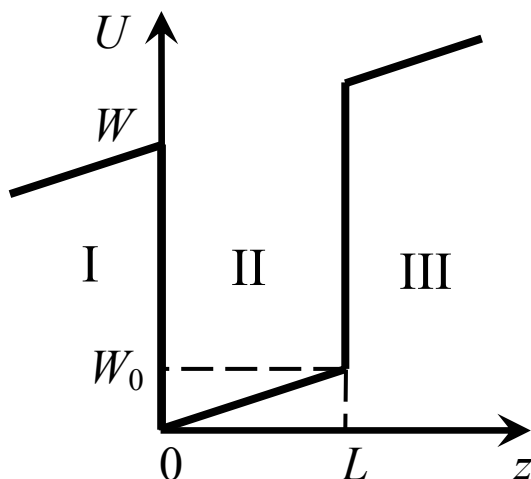


Рис. 1.6. Вид квантовой ямы с изменяющимся значением потенциала

Волновые функции электрона во всех трех областях, показанных на рис. 1.6, представляют собой линейные комбинации функций Эйри первого ( $A_i$ ) и второго ( $B_i$ ) рода. При этом для строгого решения данной задачи необходимо учитывать, что для электрона, находящегося внутри ямы, благодаря туннельному эффекту существует конечная вероятность прохождения через треугольный барьер (в область  $z < 0$  на рис. 1.6), т. е. в область квазинепрерывного спектра. В результате, для ямы конечной глубины даже внутри нее имеется не чисто дискретный, а квазинепрерывный спектр. Решение

этой задачи является достаточно сложным и громоздким. Даже если пренебречь туннелированием электронов, энергетический спектр в яме, показанной на рис. 1.6, может быть рассчитан только численными методами. При этом конкретный вид решения сильно зависит от параметров используемой гетероструктуры. По этой причине мы кратко рассмотрим ниже только предельный случай, когда высота барьера  $W$  устремляется к бесконечности. В этом случае полный потенциал, действующий на электрон, определяется выражением

$$U(z) = \begin{cases} \infty & \text{при } z < 0, z > L \\ zW_0 & \text{при } 0 \leq z \leq L \end{cases}. \quad (1.21)$$

Поскольку вероятность выхода электрона из области ямы в таком случае равна нулю, для нахождения энергетического спектра нужно решать уравнение вида (1.4) с потенциалом (1.21) и граничными условиями вида:

$$\psi_n(0) = 0, \quad \psi_n(L) = 0.$$

Вводя новую переменную  $\xi = \left(\frac{2m^*W_0}{\hbar^2}\right)^{1/3} \cdot \left(z - \frac{E_n}{W_0}\right)$ , где  $E_n = E - E_k$ , сведем уравнение (1.4) к виду

$$\frac{d^2\psi_n(\xi)}{d\xi^2} - \xi\psi_n(\xi) = 0. \quad (1.22)$$

Общее решение этого уравнения, как и в случае ямы с конечными стенками, есть линейная комбинация функций  $\text{Ai}(\xi)$  и  $\text{Bi}(\xi)$ :

$$\psi_n(\xi) = C_1\text{Ai}(\xi) + C_2\text{Bi}(\xi). \quad (1.23)$$

Используя граничные условия, получаем уравнение для определения положений энергетических уровней в рассматриваемой яме:

$$\text{Ai}(\xi(z=L))\text{Bi}(\xi(z=0)) - \text{Ai}(\xi(z=0))\text{Bi}(\xi(z=L)) = 0$$



и выражение для соотношения коэффициентов  $C_1$  и  $C_2$  в (1.23):

$$\frac{C_1}{C_2} = -\frac{\text{Ai}(\xi(z=L))}{\text{Bi}(\xi(z=L))} = -\frac{\text{Ai}(\xi(z=0))}{\text{Bi}(\xi(z=0))}.$$

При этом для нахождения значений коэффициентов  $C_1$  и  $C_2$  необходимо использовать условие нормировки волновой функции:

$$\int_0^L \psi_n(z) \psi_n^*(z) dz = 1.$$

В общем случае при произвольной ширине ямы решение уравнения (1.22) может быть получено только численными или приближенными (использующими известные асимптотики для функций Эйри) методами. Однако существует частный случай, в котором нахождение уровней энергии существенно упрощается. При  $W_0 \rightarrow \infty$  мы переходим к случаю треугольной потенциальной ямы. Тогда граничное условие для уравнения (1.22) вида  $\psi_n(L) = 0$  должно быть заменено на  $\psi_n(z \rightarrow \infty) \rightarrow 0$ . Напомним, что функции Эйри  $\text{Ai}$  и  $\text{Bi}$  являются осциллирующими при  $z < 0$ , а при  $z > 0$   $\text{Ai}(z) \rightarrow 0$ ,  $\text{Bi}(z) \rightarrow \infty$ . Следовательно, для выполнения граничных условий в (1.23) в этом случае необходимо положить  $C_2 = 0$ . Тогда

$$\psi_n(z) = C_1 \text{Ai} \left( \left( \frac{2m^* W_0}{\hbar^2} \right)^{1/3} \cdot (z - E_n / W_0) \right), \quad (1.24)$$

а энергетический спектр электронов определяется из граничного условия  $\psi_n(z=0) = 0$ , т. е.

$$\text{Ai} \left( -E_n / W_0 \cdot \left( \frac{2m^* W_0}{\hbar^2} \right)^{1/3} \right) = 0. \quad (1.25)$$

Уравнение (1.25) дает уровни энергии в виде:

$$E_n = -\xi_n W_0 \left( \frac{2m^* W_0}{\hbar^2} \right)^{-1/3} = \left( \frac{\hbar^2 W_0^2}{2m^*} \right)^{1/3} (-\xi_n), \quad (1.26)$$

где  $\xi_n$  – нули функции Эйри  $\text{Ai}(\xi)$ , первые пять из которых есть  $-2,338$ ,  $-4,087$ ,  $-5,52$ ,  $-6,787$ ,  $-7,944$ , а для больших  $n$  верно соотношение  $\xi_n \approx -(3/2\pi(n+3/4))^{2/3}$ . Из приведенных значений видно, что нули функции Эйри сгущаются при увеличении ее аргумента, т.е. расстояние между уровнями размерного квантования в бесконечной треугольной потенциальной яме с фиксированным значением  $W_0$ , в отличие от случая прямоугольной ямы, уменьшается с ростом  $n$ , что может быть качественно объяснено «эффективным расширением» потенциальной ямы для электрона при увеличении его энергии.

В заключение заметим, что в случае достаточно слабого изменения потенциала (1.21) для вычисления уровней энергии в яме, показанной на рис. 1.6, но с бесконечными стенками, можно воспользоваться теорией возмущений, взяв за нулевое приближение положение энергетических уровней в бесконечной прямоугольной потенциальной яме  $E_n^{(0)}$  (см. формулу (1.6)). В первом порядке теории возмущений получаем смещение уровней размерного квантования на фиксированную величину:

$$E_n^{(1)} \approx E_n^{(0)} + W_0/2,$$

т.е. положение уровней относительно дна ямы в точке  $z = L/2$  остается неизменным. Во втором порядке для основного состояния ( $n = 1$ ) получаем

$$E_1^{(2)} \approx E_1^{(0)} + W_0/2 - 1.08 \cdot 10^{-2} \frac{W_0^2}{E_1^{(0)}},$$

т. е. энергия основного состояния понижается относительно случая бесконечной потенциальной ямы.

### 1.2.5. Экспоненциальная потенциальная яма

Последним видом квантовой ямы, который мы рассмотрим в данном разделе, является полубесконечная яма с экспоненциальным потенциалом (рис. 1.7):

$$U(z) = \begin{cases} \infty & \text{при } z \leq 0 \\ -We^{-\alpha z} & \text{при } z > 0 \end{cases} \quad (1.27)$$

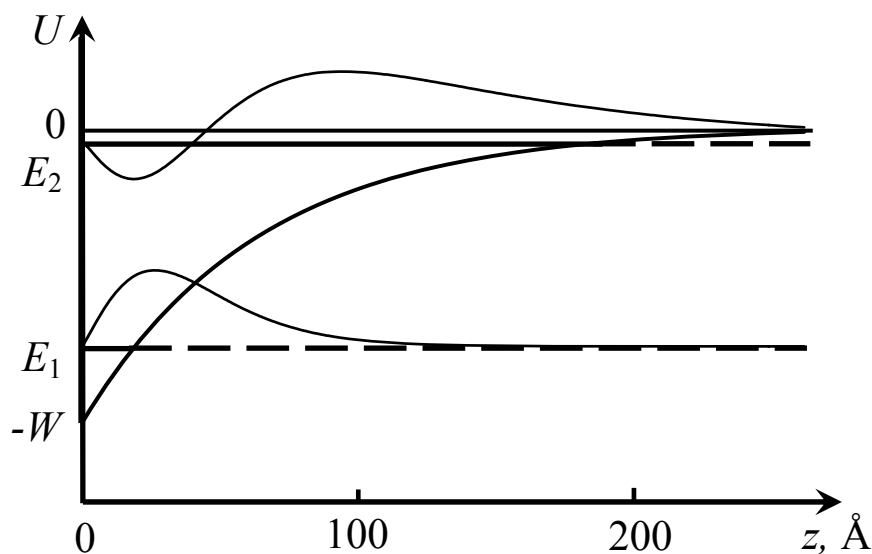


Рис. 1.7. Вид потенциала, положение энергетических уровней и волновые функции электрона в экспоненциальной потенциальной яме с параметрами  $m^* = 0,067m_0$ ,  $W = 0,7$  эВ,  $1/\alpha = 30 \text{ \AA}$

Потенциал такой формы является достаточно хорошим приближением для рассмотрения возможности образования уровней размерного квантования в МДП-структурах при подаче напряжения на металлический электрод и образовании за счет этого изгиба зон в приповерхностной области полупроводника (так называемое поверхностное квантование). При наличии потенциала (1.27) уравнение Шредингера для  $z$ -компоненты волновой функции электронов принимает вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 \psi_n(z)}{dz^2} - W e^{-\alpha z} \psi_n(z) = E_n \psi_n(z), \quad (1.28)$$

а граничные условия записываются в виде

$$\psi_n(0) = 0, \quad \psi_n(z \rightarrow \infty) = 0. \quad (1.29)$$

Отметим, что в силу задания начала отсчета энергии (см. рис. 1.7), корни уравнения (1.29), т. е. энергии уровней размерного квантования являются отрицательными. Вводя переменную  $t^2 = e^{-\alpha z}$ , приводим уравнение (1.28) к виду

$$t^2 \frac{d^2 \psi_n(t)}{dt^2} + t \frac{d\psi_n(t)}{dt} + \frac{8Wm^*}{\hbar^2} t^2 \psi_n - \frac{\alpha m^* |E|}{\hbar^2} \psi_n = 0.$$

Далее, вводя безразмерную константу  $\nu^2 = 8m^* |E| / \alpha^2 \hbar^2$  и еще одну новую переменную  $\xi^2 = (8m^* W / \alpha^2 \hbar^2) t^2$ , окончательно получаем

$$\xi^2 \frac{d^2 \psi_n(\xi)}{d\xi^2} + \xi \frac{d\psi_n(\xi)}{d\xi} + (\xi^2 - \nu^2) \psi_n(\xi) = 0. \quad (1.30)$$

Уравнение (1.30) есть стандартное уравнение Бесселя, его решением в общем случае является линейная комбинация функций Бесселя положительного и отрицательного порядков:

$$\psi_n(\xi) = C_1 J_\nu(\xi) + C_2 J_{-\nu}(\xi).$$

Поскольку  $\xi = 0$  соответствует  $z \rightarrow \infty$ , а  $J_{-\nu}(0) \rightarrow \pm\infty$ , второе граничное условие в выражении (1.29) требует положить  $C_2 = 0$ . Тогда, возвращаясь к исходным координатам, имеем решение уравнения (1.28) в виде:

$$\psi_n(z) = C_1 J_{\frac{2\sqrt{2m^*|E_n|}}{\alpha\hbar}} \left( \sqrt{\frac{8Wm^*}{\alpha^2\hbar^2}} e^{-\frac{\alpha}{2}z} \right), \quad (1.31)$$

где, как обычно, константа  $C_1$  определяется из условия нормировки.

Используя первое из граничных условий (1.29), получаем уравнение для нахождения энергетического спектра в экспоненциальной квантовой яме:

$$J_{\frac{2\sqrt{2m^*|E_n|}}{\alpha\hbar}}\left(\sqrt{\frac{8Wm^*}{\alpha^2\hbar^2}}\right) = 0. \quad (1.32)$$

Проанализируем уравнение (1.32) для нахождения условия существования связанного состояния внутри квантовой ямы. Появлению первого уровня размерного квантования соответствует  $E_n = 0$ , следовательно, для этого должно быть выполнено условие

$$J_0\left(\sqrt{\frac{8Wm^*}{\alpha^2\hbar^2}}\right) = 0. \quad (1.33)$$

Как известно из литературы по специальным функциям, первый ноль функции Бесселя  $J_0(\zeta)$  есть  $\zeta_1 \approx 2,41$ . Следовательно, условие наличия связанного состояния в экспоненциальной потенциальной яме выглядит следующим образом:

$$W/\alpha^2 \geq (2,41)^2 \hbar^2/8m^*. \quad (1.34)$$

Из (1.34) видно, что как и в случае несимметричной прямоугольной потенциальной ямы, при определенных значениях параметров ямы экспоненциальной формы (малая глубина или очень резкое падение модуля потенциала  $U(z)$ ) уровни размерного квантования в ней **будут отсутствовать**. Таким образом, в МДП-структурах эффект поверхностного квантования будет возникать только при превышении величины потенциала, прикладываемого к металлическому электроду, некоторого критического значения  $V_{кр}$ .

При выполнении условия (1.34) и дальнейшем увеличении параметра  $W/\alpha^2$  значение порядка функции Бесселя  $\nu$ , при котором выполняется условие  $J_\nu(\xi(z=0)) = 0$ , увеличивается, т. е. уровень энергии  $E_1$  сдвигается вглубь потенциальной ямы. Второй уровень

размерного квантования появляется, если значение  $W/\alpha^2$  достигает величины, при которой функция  $J_0(\xi(z=0))$  имеет следующий ноль и т. д. Таким образом, общее число корней уравнения (1.32) и, соответственно, количество уровней размерного квантования в рассматриваемой яме определяется выражением

$$W/\alpha^2 \geq (\zeta_n)^2 \hbar^2 / 8m^*,$$

где  $\zeta_n$  –  $n$ -ый ноль функции  $J_0(\zeta)$ . Значения первых пяти нулей функции Бесселя нулевого порядка есть 2,41, 5,52, 8,65, 11,79, 14,93.

В качестве примера на рис. 1.7 приведены уровни энергии и волновые функции, рассчитанные для ямы с параметрами  $m^* = 0,067m_0$ ,  $W = 0,7$  эВ,  $z_0 = 1/\alpha = 30 \text{ \AA}$ . Расчет по формуле (1.32) дает в этом случае два уровня размерного квантования с энергиями  $E_1 = -520$  мэВ и  $E_2 = -32$  мэВ, волновые функции на этих уровнях рассчитаны по (1.31). Видно, что, как и в рассмотренном в п. 1.1.3 примере для случая несимметричной прямоугольной потенциальной ямы, при заданных параметрах второй уровень размерного квантования оказывается расположенным очень близко к границе энергетического барьера. Это приводит к тому, что состояние электронов на этом уровне оказывается близкими к делокализованному (значение волновой функции в подбарьерной области является достаточно большим).

### ***1.2.6. Двумерный электронный газ***

Таким образом, во всех рассмотренных выше примерах мы видели, что существенное понижение геометрического размера системы в одном направлении, критерием которого является выполнение условия (1.1), приводит к тому, что энергетический спектр электронов существенно изменяется. Его общий вид во всех рассмотренных случаях может быть представлен следующим образом:

$$E = \frac{\hbar^2 k_{\parallel}^2}{2m^*} + E_n, \quad (1.35)$$

где  $k_{\parallel} = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ , а  $E_n$  – энергия, соответствующая уровням размерного квантования. При этом первое слагаемое в (1.35) представляет собой квазинепрерывную компоненту, связанную с движением электрона в плоскости  $(x, y)$ , параллельной границе материала в направлении, где его геометрический размер понижен. Второе слагаемое в уравнении (1.35) представляет собой дискретную часть спектра, связанную с движением электрона в направлении пониженного размера материала. Конкретный вид этой компоненты зависит от размеров и формы потенциальной ямы, созданной для электрона в направлении  $z$  и ограничивающей его движение в этом направлении. Таким образом, квазинепрерывный спектр, характерный для объемных кристаллов, при уменьшении одного из геометрических размеров распадается на набор подзон размерного квантования (см., например, рис. 1.1, б). Электронный газ, энергетический спектр которого подчиняется закону (1.35), называется двумерным электронным газом или 2DEG (two dimensional electron gas).

Необходимо отметить два важных обстоятельства. Во-первых, поскольку в каждой из подзон размерного квантования электрон может обладать любой энергией, в том числе и большей, чем энергия, соответствующая дну следующей подзоны, он может, в принципе, переходить из одной подзоны в другую, например, вследствие рассеяния. Кроме того, наличие компоненты импульса, параллельной границе квантовой ямы, приводит к изменению положения энергетических уровней электрона в яме (а в более общем случае и к изменению вида энергетического спектра) относительно значений, полученных выше для ям различной формы. Влияние этого обстоятельства мы рассмотрим подробнее в п. 1.5.2. Во-вторых, электронный газ в рассматриваемых системах не является двумерным

в строгом смысле этого термина. Как мы уже отмечали (см. п. 1.2.3 и 1.2.5), при определенных значениях параметров квантовой ямы конечной высоты электроны, находящиеся в ней, имеют достаточно большую вероятность выйти за ее пределы, что подавляет эффект размерного квантования и приближает энергетический спектр таких электронов к обычному квазинепрерывному. Кроме того, конечный (и очень малый по величине) геометрический размер потенциальной ямы  $L$  приводит, в соответствии с принципом неопределенности Гейзенберга, к увеличению неопределенности в значении  $z$ -компоненты импульса электрона согласно  $\delta p_z \delta z \approx \hbar$ , откуда следует, что неопределенность в энергии электрона по порядку величины есть:

$$\delta E \approx \frac{\hbar^2}{2m^* L^2}.$$

Очевидно, что при конечных энергетических размерах ямы и очень малых  $L$  значение  $\delta E$  может превысить высоту энергетического барьера для электрона, находящегося в квантовой яме, что приведет к возникновению большой вероятности его перехода в область квазинепрерывного спектра. Последнее обстоятельство может весьма существенно сказаться на свойствах энергетического спектра как свободных, так и локализованных носителей заряда в квантовой яме, и его, в ряде случаев, необходимо учитывать.

Таким образом, терминологически правильнее называть рассматриваемый электронный газ *квазидвумерным*.

### 1.3. КВАНТОВЫЕ НИТИ

Выше мы рассмотрели случай, когда один из геометрических размеров системы сильно уменьшен, вследствие чего электронный газ в таких объектах становится квазидвумерным. Однако размерность системы может быть понижена не только в одном направлении. Если неравенству (1.1) удовлетворяют два из геометрических размеров, то



движение электронов остается свободным только в одном направлении. Такие системы называются квантовыми нитями. Они могут быть получены как из квазидвумерных систем применением субмикронной литографии, так и целым рядом других методов. Наиболее используемыми в настоящее время являются методы самоорганизации, достаточно подробно описанные в литературе.

Рассмотрим способ описания электронного газа в квантовых нитях. В этом случае в предположении бесконечного потенциала, ограничивающего движение носителей заряда в направлениях  $z$  и  $y$ , необходимо решать уравнение Шредингера (1.2) с потенциалом следующей формы:

$$U(y, z) = \begin{cases} \infty & \text{при } 0 < z < L_1, \quad 0 < y < L_2 \\ 0 & \text{при } z < 0, \quad z > L_1, \quad y < 0, \quad y > L_2 \end{cases},$$

где  $L_1$  и  $L_2$  – размеры кристалла в направлениях  $z$  и  $y$ , соответственно. Как и в случае квантовой ямы, переменные в уравнении (1.2) в этом случае разделяются, и мы приходим к трем уравнениям Шредингера следующего вида:

$$\begin{aligned} -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 \psi_1(x)}{dx^2} + \psi_1(x) &= E_k \psi_1(x), \\ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 \psi_{n_1}(z)}{dz^2} + U(z) \psi_{n_1}(z) &= E_{n_1} \psi_{n_1}(z), \\ -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{d^2 \psi_{n_2}(y)}{dy^2} + U(y) \psi_{n_2}(y) &= E_{n_2} \psi_{n_2}(y), \end{aligned}$$

при этом полная волновая функция электрона есть  $\psi(x, y, z) = \psi_1(x) \psi_{n_1}(z) \psi_{n_2}(y)$ , его полная энергия –  $E = E_k + E_{n_1} + E_{n_2}$ , а потенциалы  $U(z)$  и  $U(y)$  – обычные одномерные ограничивающие потенциалы. Очевидно, что решением первого из приведенных уравнений является плоская волна, распространяющаяся в направлении  $x$ , и квазинепрерывный

энергетический спектр, второе и третье уравнения дают дискретные уровни энергии и волновые функции на них, аналогичные формулам (1.6) и (1.5). Таким образом, полное решение уравнения Шредингера для квантовой нити есть:

$$\psi(x, y, z) = e^{ik_x x} \frac{2}{\sqrt{L_1 L_2}} \sin(\pi n_1 z / L_1) \sin(\pi n_2 y / L_2), \quad (1.36)$$

$$E = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^* L_1^2} n_1^2 + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^* L_2^2} n_2^2 = E_k + E_{n_1, n_2}, \quad (1.37)$$

где  $n_1, n_2 = 1, 2, 3, \dots$ . Как и в случае квантовых ям, каждому дискретному уровню соответствует подзона размерного квантования, связанная с движением электрона вдоль нити. При этом положение дна каждой из таких подзон (или положение уровней размерного квантования) определяется не одним, как в случае квантовой ямы, а двумя квантовыми числами  $n_1, n_2$ . Нижнему квантовому уровню (энергетический уровень основного состояния) соответствует  $n_1 = n_2 = 1$ , этот уровень вырожден только по спину электрона. Возбужденные ( $n_1 + n_2 > 2$ ) уровни могут быть различными по своим свойствам. Если найдется пара целых чисел  $n_1, n_2$  таких, что  $n_1^2 / L_1^2 + n_2^2 / L_2^2 = const$ , то соответствующий им уровень будет являться двукратно вырожденным. В частном случае  $L_1 = L_2$  степень вырождения уровня размерного квантования с номером  $n$  определяется количеством наборов двух квантовых чисел  $n_1, n_2$ , удовлетворяющих условию  $n = n_1^2 + n_2^2$ .

Таким образом, энергетический спектр квантовых нитей также представляет собой совокупность квазинепрерывной и дискретной компонент, однако первая из них связана с движением электрона только вдоль одного направления. По этой причине электронный газ в квантовых нитях называется одномерным (1DEG) или, аналогично случаю квантовых ям, квазиодномерным электронным газом.

## 1.4. КВАНТОВЫЕ ТОЧКИ

Дальнейшее понижение размерности системы происходит в случае, если условию (1.1) удовлетворяют все три ее геометрических размера. Такие системы называются квантовыми точками. В этом случае потенциал, действующий на электрон, ограничивает его движение во всех трех направлениях, и электрон оказывается «запертым» в трехмерном «потенциальном ящике». Уравнение Шредингера для электрона внутри «объемной» потенциальной ямы должно быть записано в виде\*:

$$(\hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3)\psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z), \quad (1.38)$$

где

$$\hat{H}_i = -\frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial r_i^2} + U(r_i), \quad r_i = x, y, z,$$

а  $U(r_i)$  – потенциал, ограничивающий движение электронов в направлениях  $r_i$ . После разделения переменных в уравнении (1.38) мы получим три одинаковых уравнения вида (1.4) с односторонними граничными условиями вида (1.3), различающимися только размерами объекта в направлениях  $x$ ,  $y$  и  $z$ , что приводит к следующему виду ограничивающего потенциала:

$$U(x, y, z) = \begin{cases} 0 & \text{внутри объема } V = L_1 L_2 L_3 \\ \infty & \text{вне указанного объема} \end{cases}, \quad (1.39)$$

Формально, уравнение (1.38) полностью совпадает с уравнением Шредингера для электронов в объемном кристалле размером  $V = L_1 L_2 L_3$ , решение которого дает энергетический спектр свободного электронного газа, единственное различие заключается в геометрических размерах рассматриваемого объекта. Решением уравнения (1.38) является:

---

\* Здесь мы по-прежнему полагаем, что потенциал обращается в бесконечность на границах рассматриваемого объекта.

$$\psi(x, y, z) = \sqrt{\frac{8}{V}} \sin \frac{\pi n_3 x}{L_3} \sin \frac{\pi n_2 y}{L_2} \sin \frac{\pi n_1 z}{L_1} \quad (1.40)$$

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^*} \left( \frac{n_1^2}{L_1^2} + \frac{n_2^2}{L_2^2} + \frac{n_3^2}{L_3^2} \right) = E_{n_1, n_2, n_3} \quad (1.41)$$

При равенстве размеров квантовой точки во всех трех направлениях выражение для энергии принимает вид:

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m^* L^2} n, \quad (1.42)$$

где  $n = n_1^2 + n_2^2 + n_3^2$ . Таким образом, в отличие от квантовых ям и квантовых нитей подзоны размерного квантования здесь отсутствуют, и электрон может иметь только дискретные значения энергии, определяемые набором из трех квантовых чисел согласно формуле (1.41). В результате, энергетический спектр качественно аналогичен случаю изолированного атома. При этом основное состояние ( $n_1 = n_2 = n_3 = 1$ ), как и в случае квантовой нити, вырождено только по спину, а степень вырождения остальных уровней определяется количеством наборов трех квантовых чисел, для которых выполняется условие  $n_1^2/L_1^2 + n_2^2/L_2^2 + n_3^2/L_3^2 = const$  (или, в случае  $L_1 = L_2 = L_3$ ,  $n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = n$ , где  $n$  – целое число).

Как уже отмечалось, решение (1.41) формально совпадает с видом энергетического спектра в объемном кристалле, только в случае квантовой точки характерные размеры объекта составляют десятки или сотни ангстрем, что и приводит к наличию дискретных энергетических уровней. Например, при параметрах  $m^* = 0,067m_0$  и  $L = 100 \text{ \AA}$  рассчитанный по формуле (1.42) энергетический зазор между уровнем основного ( $n = 3$ ) и первого возбужденного ( $n=6$ ) состояний составляет  $\Delta E \approx 167 \text{ мэВ}$ , что существенно превышает тепловую энергию электронов при разумных температурах ( $k_B T|_{T=300\text{K}} \approx 26 \text{ мэВ}$ ). Рассмотрим, как трансформируется

энергетический спектр при увеличении размеров кристалла до макроскопических (например,  $L = 1$  см). Пусть в (1.41)  $L_3 = 1$  см. Тогда дискретность энергетических уровней, соответствующих движению электрона вдоль оси  $x$ , будет составлять  $\Delta E \approx 1,67 \cdot 10^{-13}$  эВ, что на много порядков меньше тепловой энергии даже при очень низких температурах. Следовательно, эта компонента спектра (1.41) из дискретной превращается в квазинепрерывную, т.е. мы переходим к случаю квантовой нити, характеризующейся наличием подзон размерного квантования. Отметим, что в случае объемного кристалла при решении уравнения Шредингера обычно используются циклические граничные условия Борна-Кармана [4]. Это приводит к спектру вида  $E_{k_x} = \hbar^2 k_x^2 / 2m^*$ , где дискретность по  $k_x$  определяется выражением  $k_x = n \cdot 2\pi / L_x$ ,  $n = 1, 2, 3 \dots$ . В нашем случае при использовании других граничных условий (зануление волновой функции на границе рассматриваемой области) волновой вектор может принимать значения  $k_x = n \cdot \pi / L_x$ , что с точностью до множителя, равного двум (несущественного при выполнении условия  $\Delta E \ll k_B T$ ), совпадает с решением для объемного кристалла при использовании циклических граничных условий. Физически, устремление к бесконечности размера  $L_3$  в выражении (1.41) означает сильное уменьшение масштаба дискретности энергетических уровней, что и обеспечивает переход к случаю практически свободного движения электрона в направлении оси  $x$ . Если в выражении (1.41) устремить к бесконечности два геометрических размера, мы приходим к случаю квантовой ямы, а если все три – к обычному случаю объемного кристалла. Таким образом, выражение (1.41) является универсальным для рассмотрения характера энергетического спектра в объектах любых размеров.

## 1.5. СВЕРХРЕШЕТКИ

Везде выше мы рассматривали системы, состоящие из одиночных объектов (квантовых ям, нитей или точек). Однако достаточно часто структуры, используемые для практического применения, содержат большое количество квантовых объектов (например, квантовые нити и точки, выращенные с использованием методов самоорганизации). В этом случае возможны два варианта. Если выращенные квантовые объекты пространственно сильно разделены, то вклады каждого из них в наблюдаемые эффекты просто суммируются. С другой стороны, если они находятся настолько близко друг к другу, что вероятность туннелирования электронов из одного из них в другой становится достаточно большой, это может привести к появлению принципиально новых эффектов. Наиболее распространенным объектом такого рода являются структуры, представляющие собой чередующиеся (последовательно выращенные) слои широкозонного (с шириной запрещенной зоны  $E_{g2}$ ) и узкозонного ( $E_{g1}$ ) полупроводников, каждый из которых имеет очень малую толщину. Для слоя узкозонного полупроводника эта толщина ( $a$ ) должна удовлетворять условию (1.1), а для широкозонного ( $b$ ) – быть достаточно малой, чтобы обеспечить заметную вероятность туннелирования электрона через образованный этим слоем потенциальный барьер. Такие структуры обычно называют структурами с вертикальным переносом, и они находят достаточно широкое применение в области создания приборов наноэлектроники.

Если число последовательно чередующихся слоев полупроводников с различной шириной запрещенной зоны достаточно велико, полученная таким образом структура называется сверхрешеткой. Наиболее интересным как с физической точки зрения, так и для практических применений случаем являются сверхрешетки, в которых слои материалов с различной шириной запрещенной зоны чередуются строго периодическим образом. Это приводит к

появлению действующего на электроны и дырки дополнительного периодического потенциала, период которого равен периоду сверхрешетки  $d = a + b$ . При этом высота энергетических барьеров в сверхрешетке, представляющей собой последовательное чередование слоев различных полупроводников, равна величине разрыва зоны проводимости  $\Delta E_C$  для электронов и разрыва валентной зоны  $\Delta E_V$  для дырок. Энергетическая диаграмма такой структуры приведена на рис. 1.8. В принципе, существуют также неперiodические и квазипериодические (в которых слои различных материалов чередуются по какому-либо математическому закону) сверхрешетки, однако ниже мы ограничимся рассмотрением только случая периодических сверхрешеток.

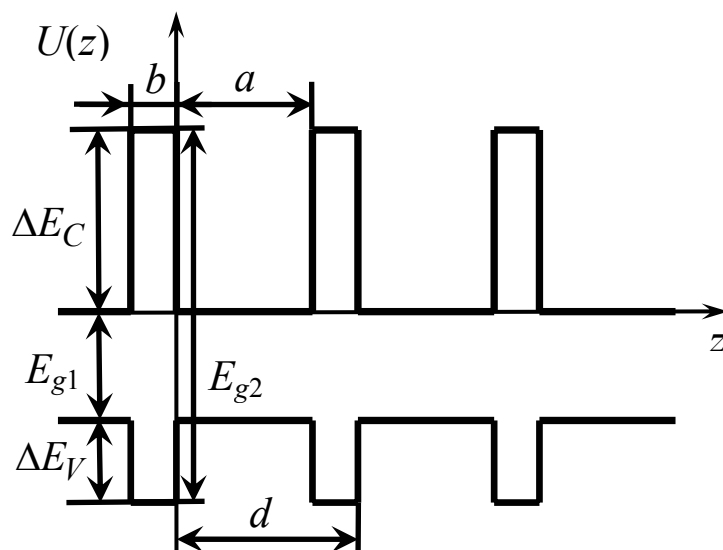


Рис. 1.8. Энергетическая диаграмма периодической сверхрешетки

### 1.5.1. Энергетический спектр периодической сверхрешетки

Для нахождения энергетического спектра электронов\* в сверхрешетке, показанной на рис. 1.8, для  $z$ -компоненты волновой функции необходимо решать уравнение Шредингера вида (1.4) с периодическим потенциалом:

\* Аналогичным образом может быть найден и энергетический спектр дырок.

$$U(z) = \begin{cases} 0, & \text{при } 0 < z < a \\ W, & \text{при } a < z < a + b \end{cases}, \quad U(z + n(a + b)) = U(z), \quad W = \Delta E_C.$$

Такую задачу удобно рассматривать в рамках модели Кронига-Пенни, которая используется и для анализа энергетического спектра электронов, находящихся в поле периодического потенциала, в обычных объемных кристаллах [4]. Вследствие периодичности потенциала  $U(z)$  волновая функция должна быть записана в виде блоховской  $\psi(z) = u(z)e^{ikz}$ , где  $u(z) = u(z + n(a + b))$  – блоховская амплитуда,  $k$  – волновой вектор электрона. Решая уравнение Шредингера для областей с различным значением потенциала  $U(z)$ , находим вид функции  $u(z)$  \*:

$$u_1(z) = Ae^{i(\alpha-k)z} + Be^{-i(\alpha-k)z}, \quad \alpha = \sqrt{2m^* E_n} / \hbar, \quad \text{при } 0 < z < a,$$

$$u_2(z) = Ce^{i(\beta-ik)z} + De^{-i(\beta-ik)z}, \quad \beta = \sqrt{2m^* (W - E_n)} / \hbar, \quad \text{при } -b < z < 0.$$

Значения коэффициентов  $A, B, C, D$  должны определяться из условий сшивки блоховских амплитуд и их производных на границе двух областей:  $u_1(0) = u_2(0)$  и  $u'_1(0) = u'_2(0)$ , а также из условия периодичности общего решения:  $u_1(a) = u_2(-b)$  и  $u'_1(a) = u'_2(-b)$ . Подстановка в эти четыре условия функций  $u_1(z)$  и  $u_2(z)$  приводит к системе из четырех линейных уравнений относительно коэффициентов  $A, B, C, D$ . Приравнявая определитель этой системы к нулю, получаем уравнение:

$$\cos(k(a + b)) = \cos(\alpha a) \operatorname{ch}(\beta b) + \frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\alpha\beta} \sin(\alpha a) \operatorname{sh}(\beta b), \quad (1.43)$$

которое и определяет энергетический спектр периодической сверхрешетки. Решение уравнения (1.43) для области энергий

---

\* Для простоты мы полагаем здесь, что эффективные массы электрона в областях барьера и ямы одинаковы. Учет их различия не приводит к качественным отличиям в конечном результате, а уравнение для нахождения энергетического спектра в этом случае будет приведено в п. 1.5.3.2.



$0 < E < W$  представляет собой последовательное чередование разрешенных и запрещенных зон. Первые соответствуют тем диапазонам энергий, для которых правая часть уравнения (1.43) оказывается ограниченной по модулю единицей, и, соответственно, значения волнового вектора, удовлетворяющие (1.43), будут вещественными. Запрещенные зоны соответствуют тем энергиям, для которых значение  $k$ , определенное из (1.43), является комплексным. Эти зоны в энергетическом спектре сверхрешетки, образующиеся из исходной зоны проводимости для электронов (или валентной зоны для дырок), называют минизонами. Отметим, что правая часть (1.43) представляет собой периодическую функцию аргумента  $\beta a$ , амплитуда колебаний которой уменьшается с ростом значения аргумента. Точки пересечения значений  $\cos(k(a+b))$ , взятых при разных  $k$ , с графиком этой функции и дают разрешенные значения энергии. Отсюда ясно, что энергетический спектр  $E_n(k)$  будет являться периодическим с периодом  $\Delta k = 2\pi/(a+b)$ . При этом поскольку в случае сверхрешетки ширина потенциального барьера  $b$  существенно больше, чем постоянная решетки материала, ширины получаемых из решения (1.43) минизон будут значительно меньше энергетических размеров разрешенных зон, получаемых при применении модели Кронига-Пенни для нахождения энергетического спектра электронов в объемном кристалле.

Конкретные значения энергетических размеров минизон определяются шириной и высотой потенциального барьера, точнее, произведением этих величин  $bW$ . В предельном случае  $bW \rightarrow 0$  из (1.43) получаем  $\cos(ka) = \cos(\alpha a)$ , т. е. обычный закон дисперсии для электронов:  $E = \hbar^2 k^2 / 2m^*$ . В противоположном пределе  $bW \rightarrow \infty$  амплитуда колебаний правой части (1.43) равна бесконечности, т.е. ее график будет представлять собой вертикальные прямые линии, определенные на оси абсцисс в точках  $\beta a = n\pi$ . В этом случае для электрона в потенциальной яме (1.43) дает  $\alpha a = n\pi$ , т. е. наличие

дискретных уровней с энергией  $E_n = (\pi^2 \hbar^2 / 2m^* a^2) n^2$ , что абсолютно совпадает с выражением для уровней энергии электрона в бесконечной прямоугольной потенциальной яме (1.6). Если выполнено условие  $bW \gg 1$ , то уравнение (1.43) может быть преобразовано в

$$\begin{aligned} \cos(k(a+b)) &\approx \frac{1}{2} \cos(\alpha a) e^{\beta b} + \frac{\beta^2 - \alpha^2}{4\alpha\beta} \sin(\beta a) e^{\beta b} = \\ &= \cos^2 \frac{\beta a}{2} \left( \operatorname{tg} \frac{\beta a}{2} + \frac{\alpha}{\beta} \right) \left( \frac{\beta}{\alpha} - \operatorname{tg} \frac{\beta a}{2} \right) \frac{1}{2} e^{\beta b}, \end{aligned}$$

откуда уравнение для нахождения энергетического спектра в пределе очень широких барьеров ( $b \rightarrow \infty$ ) принимает вид:

$$\left( \operatorname{tg} \frac{\beta a}{2} + \frac{\alpha}{\beta} \right) \left( \frac{\beta}{\alpha} - \operatorname{tg} \frac{\beta a}{2} \right) = 0$$

и дает решения для положения энергетических уровней в одиночной потенциальной яме шириной  $a$  и высотой  $W$ , совпадающие с решением (1.13).

В промежуточном случае, когда, с одной стороны, барьер достаточно велик, но, с другой стороны, вероятность туннелирования электрона представляет собой заметную величину, энергетический спектр каждой из минизон может быть найден разложением правой части уравнения (1.43) в ряд в окрестности значений  $E_n$ , где  $E_n$  – дискретные уровни энергии, соответствующие случаю изолированных квантовых ям (при отсутствии вероятности туннелирования электронов). Поскольку ширина минизон мала, в разложении в ряд можно ограничиться только первым слагаемым. Обозначив правую часть уравнения (1.43) как  $fn(E)$ , для энергии электрона в минизонах получим\*:

---

\* Отметим, что анализ функции  $fn(E)$  и ее производной показывает, что их знак определяется четностью номера уровня  $E_n$ . В результате, значение  $\eta_n$  всегда положительно, а множитель перед косинусом в выражении (1.44) будет отрицательным для нечетных  $n$  и положительным – для четных.

$$E = E_n + \eta_n + (-1)^n |\gamma_n| \cos(k(a+b)), \quad (1.44)$$

где

$$\eta_n = -fn(E_n) \left( \frac{dfn}{dE} \right)_{E=E_n}^{-1}, \quad \gamma_n = \left( \frac{dfn}{dE} \right)_{E=E_n}^{-1}.$$

Из (1.44) видно, что наличие взаимодействия между квантовыми ямами приводит к двум следствиям. Во-первых, положение энергетических уровней сдвигается на величину  $\eta_n$  по шкале энергии, во-вторых, каждый из них превращается в зону с энергетическим размером  $\Delta E = 2\gamma_n$ . Однако, как видно из (1.43)  $fn(E), fn'(E) \propto e^{b\beta}$ . Следовательно, в случае фиксированных размеров потенциальной ямы при уменьшении ширины потенциального барьера величина  $\gamma_n$  возрастает экспоненциально, а величина  $\eta_n$  — существенно более слабым образом. Поэтому в первом приближении эффектом энергетического сдвига уровней  $E_n$  по сравнению с образованием из них минизон можно пренебречь.

Отметим, что если мы рассматриваем  $N$  одинаковых квантовых ям, то каждый из энергетических уровней при отсутствии туннелирования электронов будет  $N$ -кратно вырожден, а образование минизоны снимает это вырождение. Дополнительно укажем, что из анализа уравнения (1.43) следует, что величина  $\gamma_n$  увеличивается с ростом порядкового номера минизоны, т. е. энергетический размер верхних минизон больше, чем нижних. Качественно это связано с тем, что для электронов, имеющих большую энергию в яме эффективная высота потенциального барьера уменьшается, что приводит к росту вероятности туннелирования и, соответственно, увеличению ширины минизоны  $\Delta E$ . В результате, при уменьшении ширины потенциального барьера минизоны образуются, прежде всего, при расщеплении верхнего энергетического уровня и только при дальнейшем уменьшении величины  $b$  возникают в окрестности

более низколежащих уровней. Качественно трансформация энергетического спектра сверхрешетки в случае фиксированной ширины потенциальной ямы  $a$  и изменяющейся ширины потенциального барьера  $b$  показана на рис. 1.9, который наглядно демонстрирует все отмеченные выше особенности. Отметим, что при достаточно малой ширине барьера верхняя граница минизоны, соответствующей верхнему уровню размерного квантования в потенциальной яме ( $E_3$  на рис. 1.9), может достичь области квазинепрерывного спектра, и электроны в ней становятся полностью делокализованными, а при стремлении ширины барьера к нулю все минизоны пересекаются, и энергетический спектр, как и следовало ожидать, становится квазинепрерывным.

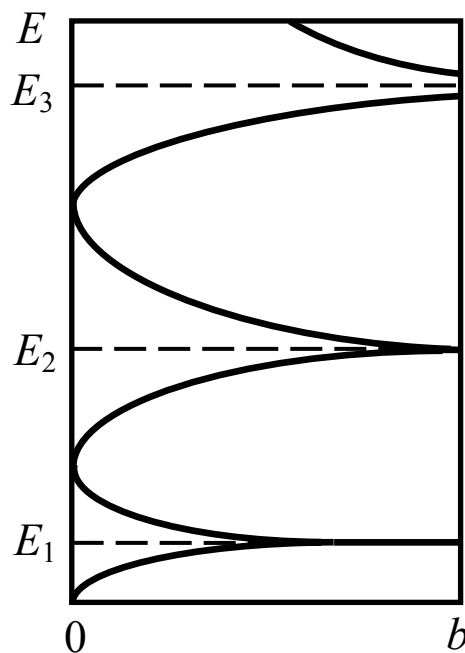


Рис. 1.9. Изменение структуры минизон в сверхрешетке при изменении ширины потенциального барьера

Энергетический спектр сверхрешеток может быть получен и другим способом. Если использовать модель сильной связи, взяв за основное состояние уровни энергии в изолированных квантовых ямах, и учесть возможность туннелирования электронов, можно

получить выражение для энергии, совпадающее с (1.44). При этом значение параметра  $\gamma$  определяется матричным элементом вероятности туннелирования электрона из одной квантовой ямы в другую. Очевидно, что чем меньше высота и ширина барьера, тем больше значение  $\gamma_n$ , а при фиксированном значении  $W$  размер минизоны  $\Delta E = 2\gamma_n \propto (a + b)^{-1}$ . Отсюда становится очевидным уже отмеченное выше обстоятельство – поскольку период сверхрешетки существенно больше, чем межатомное расстояние в кристаллах, ширина минизон оказывается очень небольшой, что и определило их название. В реальных структурах значение  $\Delta E$  составляет десятые или даже сотые доли электронвольта.

Следует подчеркнуть, что при анализе энергетического спектра сверхрешеток мы рассматривали только направление, в котором чередуются слои полупроводников с различной шириной запрещенной зоны. В плоскости этих слоев электроны продолжают двигаться свободно, как в объемном кристалле. Следовательно, как и в случае квантовых нитей, энергетический спектр сверхрешеток представляет собой совокупность квазинепрерывной компоненты спектра и компоненты, определяемой (1.44):

$$E = \frac{\hbar^2(k_x^2 + k_y^2)}{2m^*} + [E_n + \eta_n + (-1)^n \gamma_n \cos(k(a + b))]. \quad (1.45)$$

При этом в отличие от случая квантовых ям различной формы вторая компонента в (1.45) также является квазинепрерывной, хотя и определенной на существенно меньшем, по сравнению с первой компонентой, энергетическом масштабе. В результате, электронную систему в сверхрешетках можно рассматривать как промежуточный случай между обычным трехмерным и квазидвумерным электронным газом.

### **1.5.2. Влияние направления движения электрона на его энергетический спектр**

При выводе выражений для энергетического спектра сверхрешеток, мы, так же как и в случае квантовых ям, рассматривали движение электрона в направлении  $z$ , а затем добавляли к полученным уровням энергии квазинепрерывную компоненту, связанную с движением в плоскости  $(x, y)$ . В то же время, энергия электрона является величиной, не зависящей от направления его движения. В результате, учет трехмерного характера движения может привести к некоторому изменению полученных выше выражений. Ниже мы кратко рассмотрим этот эффект.

Пусть, как обычно, потенциальные ямы и барьеры в сверхрешетке чередуются в направлении  $z$  (см. рис. 1.8), а в плоскости  $(x, y)$  электрон движется свободно. С целью рассмотрения общего случая будем считать, что эффективные массы электронов в области ямы ( $m_W^*$ ) и барьера ( $m_B^*$ ) различны. Рассмотрим электрон, находящийся в области потенциальной ямы, пусть он имеет энергию  $E_W$  и волновой вектор  $\mathbf{k}_W = k_z + k_x + k_y = k_\perp + k_\parallel$ . При переходе в область потенциального барьера эти значения меняются на  $E_B$  и  $\mathbf{k}_B = k'_z + k'_x + k'_y = k'_\perp + k'_\parallel$ . Поскольку  $x$ - и  $y$ -компоненты волновой функции представляют собой плоские волны и должны быть непрерывны на границе двух областей,  $k_y = k'_y$  и  $k_x = k'_x$  или  $k_\perp = k'_\perp$ . При этом из закона сохранения энергии следует:

$$\frac{\hbar^2(k_\parallel^2 + k_\perp^2)}{2m_W^*} = \frac{\hbar^2(k'_\parallel^2 + k'_\perp^2)}{2m_B^*} + W.$$

Согласно результатам, полученным в п. 1.5.2,  $k_\perp = \alpha = \sqrt{2m_W^2 E_\perp} / \hbar$ , где  $E_\perp$  – энергия, связанная с движением электрона в направлении  $z$ , следовательно,

$$k'_{\perp} = \sqrt{\frac{2m_B^*}{\hbar^2} \left[ E_{\perp} - W + E_{\parallel} \left( 1 - m_W^*/m_B^* \right) \right]}, \quad (1.46)$$

где  $E_{\parallel} = \hbar^2 k_{\parallel}^2 / 2m_W^*$  – энергия, связанная с движением электрона в области потенциальной ямы параллельно ее границе. Отметим, что определенная таким образом величина  $k'_{\perp}$  может являться мнимой.

Сравнивая выражение (1.46) с вещественной величиной  $\beta = \sqrt{2m^*(W - E_n)} / \hbar$ , полученной при рассмотрении одномерного случая (см. п. 1.5.1 для сверхрешеток или п. 1.2.2 для квантовых ям), можно отметить две важные особенности. Во-первых, даже при отсутствии различия в значениях эффективных масс электрона в области квантовой ямы и вне ее, эффективная высота барьера  $W_{\text{эфф}}$ , который необходимо преодолеть электрону для проникновения в подбарьерную область, определяется не значением  $W - E$ , где  $E$  – полная энергия электрона, а величиной  $W - E_{\perp}$ , где  $E_{\perp} = \hbar^2 k_{\perp}^2 / 2m^*$  – только часть полной энергии электрона  $E = E_{\perp} + E_{\parallel}$ , т. е.  $E_{\perp} < E$ , и, следовательно,  $W_{\text{эфф}} > W$ . Во-вторых, в общем случае (при  $m_W^* \neq m_B^*$ ) значение  $W_{\text{эфф}}$  определяется выражением  $W_{\text{эфф}} = W - E_{\perp} - E_{\parallel} \left( 1 - m_W^*/m_B^* \right)$ , т. е. в силу различия в эффективных массах электрона в различных пространственных областях зависит от энергии его движения в плоскости, параллельной границе слоев. Видно, что эффективная высота барьера существенно зависит от соотношения как эффективных масс электрона, так и составляющих его энергии, соответствующих различным направлениям движения. В большинстве случаев и для сверхрешеток, и для одиночных гетероструктур характерно выполнение условия  $m_W^* < m_B^*$ , в этом случае  $W_{\text{эфф}} < W - E_{\perp}$ . Более того, при определенных параметрах структуры и значении  $E_{\parallel}$ , а именно, если  $E_{\parallel} \left( 1 - m_W^*/m_B^* \right) > W - E_{\perp}$ , потенциальный барьер может, в принципе, превратиться в

потенциальную яму. При выполнении обратного соотношения ( $m_W^* > m_B^*$ ) значение эффективной высоты барьера, который требуется преодолеть электрону, будет увеличиваться.

### 1.5.3. Использование метода матриц переноса

При анализе свойств электронов в сверхрешетках (как в рассмотренных выше периодических, так и в непериодических) удобно воспользоваться так называемым методом матриц переноса, позволяющим достаточно легко находить вид как волновых функций в различных областях, так и энергетический спектр электронов даже при сложной форме потенциала сверхрешетки. Ниже мы рассмотрим этот метод и некоторые примеры его применения.

#### 1.5.3.1. Формализм матриц переноса

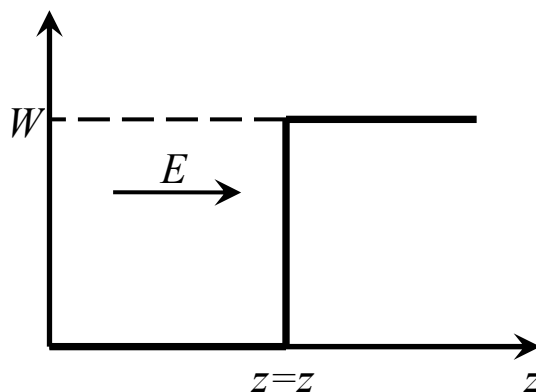


Рис. 1.10. Вид потенциального барьера для электрона

Пусть электрон с энергией  $E$  движется в поле потенциала  $U(z)$ , резко изменяющегося в точке  $z = z_0$ , например образующего при этом значении координаты барьер высотой  $W$  (рис. 10). Решение уравнения Шредингера в общем случае, включая возможность наличия различий в значениях эффективной массы электрона в областях  $z < z_0$  и  $z > z_0$  имеет вид:



$$\psi(z) = \begin{cases} A_1 e^{ik_1 z} + B_1 e^{-ik_1 z}, & z < z_0, \\ A_2 e^{ik_2 z} + B_2 e^{-ik_2 z}, & z > z_0, \end{cases} \quad (1.47)$$

где  $k_1 = \sqrt{2m_1^* E}/\hbar$  – вещественная величина, а  $k_2 = \sqrt{2m_2^*(E - W)}/\hbar$  может быть как вещественной, так и мнимой в зависимости от соотношения  $E$  и  $W$ ,  $m_1^*$ ,  $m_2^*$  – эффективные массы в различных пространственных областях. Используя стандартные условия сшивки волновых функций и их производных на границе двух областей (см. п. 1.2.2), получаем:

$$\begin{aligned} A_1 e^{ik_1 z_0} + B_1 e^{-ik_1 z_0} &= A_2 e^{ik_2 z_0} + B_2 e^{-ik_2 z_0}, \\ \frac{1}{m_1^*} ik_1 (A_1 e^{ik_1 z_0} - B_1 e^{-ik_1 z_0}) &= \frac{1}{m_2^*} ik_2 (A_2 e^{ik_2 z_0} - B_2 e^{-ik_2 z_0}). \end{aligned}$$

Введем значения определенных с точностью до постоянного множителя амплитуд вероятности движения электрона вдоль или против оси  $z$ , соответствующих различным пространственным областям  $n$ :

$$a_n(z) = \sqrt{k_n/m_n^*} A_n e^{ik_n z}, \quad b_n(z) = \sqrt{k_n/m_n^*} B_n e^{-ik_n z}. \quad (1.48)$$

Из условий сшивки в точке  $z = z_0$  получаем

$$\begin{cases} \sqrt{\frac{m_1^* k_2}{m_2^* k_1}} (a_1 + b_1) = a_2 + b_2, \\ \sqrt{\frac{m_2^* k_1}{m_1^* k_2}} (a_1 - b_1) = a_2 - b_2. \end{cases} \quad (1.49)$$

Введя параметр  $\lambda = \sqrt{m_1^* k_2 / m_2^* k_1}$ , перепишем формулу (1.49) в виде

$$\begin{aligned} a_2(z_0 + 0) &= \frac{1}{2} \left( \lambda + \frac{1}{\lambda} \right) a_1(z_0 - 0) + \frac{1}{2} \left( \lambda - \frac{1}{\lambda} \right) b_1(z_0 - 0), \\ b_2(z_0 + 0) &= \frac{1}{2} \left( \lambda - \frac{1}{\lambda} \right) a_1(z_0 - 0) + \frac{1}{2} \left( \lambda + \frac{1}{\lambda} \right) b_1(z_0 - 0). \end{aligned} \quad (1.50)$$

Таким образом, точке  $z = z_0$ , в которой потенциал  $U(z)$  претерпевает скачок, можно сопоставить элементы  $t_{jj'}$  матрицы переноса  $\hat{t}$ , которая связывает значения амплитуд вероятности в различных пространственных областях:

$$\begin{aligned} a_2(z_0 + 0) &= t_{11} a_1(z_0 - 0) + t_{12} b_1(z_0 - 0), \\ b_2(z_0 + 0) &= t_{21} a_1(z_0 - 0) + t_{22} b_1(z_0 - 0) \end{aligned} \quad (1.50)$$

или

$$\begin{pmatrix} a_2(z_0 + 0) \\ b_2(z_0 + 0) \end{pmatrix} = \hat{t} \begin{pmatrix} a_1(z_0 - 0) \\ b_1(z_0 - 0) \end{pmatrix}$$

где

$$\hat{t} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \left( \lambda + \frac{1}{\lambda} \right) & \left( \lambda - \frac{1}{\lambda} \right) \\ \left( \lambda - \frac{1}{\lambda} \right) & \left( \lambda + \frac{1}{\lambda} \right) \end{pmatrix} \quad (1.51)$$

Отметим, что введенная матрица  $\hat{t}$  унимодулярна, т. е. для ее элементов выполняется соотношение  $t_{11} t_{22} - t_{12} t_{21} = 1$ , а обратная матрица дается заменой в выражении для  $\lambda$  величин  $k_1, k_2$  и  $m_1^*, m_2^*$  на  $k_2, k_1$  и  $m_2^*, m_1^*$ , соответственно.

Удобство изложенного подхода заключается в следующем. В случае, когда рассматриваемая квантово-размерная структура содержит несколько слоев с различными параметрами, матрицы переноса, аналогичные (1.51), могут быть записаны для каждой из точек изменения потенциала. При этом общая матрица переноса  $\hat{T}$ , описывающая изменение амплитуд вероятности при переходе электрона из начальной области в конечную, может быть получена просто перемножением ряда матриц переноса, соответствующих каждой из точек скачка потенциала, а изменениям амплитуды вероятности при движении электрона внутри областей постоянства потенциала. Анализ вида матриц переноса, как уже говорилось,

позволяет определить ряд физических параметров, описывающих конкретную структуру. Ниже мы рассмотрим ряд примеров применения изложенного метода.

### 1.5.3.2. Примеры применения метода матриц переноса

Электрон в симметричной прямоугольной потенциальной яме с конечными стенками. Рассмотрим электрон, находящийся в потенциальной яме, показанной на рис. 1.2, но характеризующийся различными значениями эффективной массы в областях ямы и барьера ( $m_1^* = m_B^*, m_2^* = m_W^*$ ). В этом случае

$$\begin{pmatrix} a_3(+L) \\ b_3(+L) \end{pmatrix} = \hat{t} \begin{pmatrix} a_1(-0) \\ b_1(-0) \end{pmatrix}, \quad (1.52)$$

где общая матрица переноса  $\hat{T}$ , описывающая изменение амплитуд вероятности при переходе из области I в область III, должна быть представлена в виде  $\hat{T} = \hat{t}_3 \hat{t}_2 \hat{t}_1$ , т. е.:

$$\hat{T} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \left( \lambda + \frac{1}{\lambda} \right) & \left( \lambda - \frac{1}{\lambda} \right) \\ \left( \lambda - \frac{1}{\lambda} \right) & \left( \lambda + \frac{1}{\lambda} \right) \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} e^{ik_2L} & 0 \\ 0 & e^{-ik_2L} \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \left( \lambda + \frac{1}{\lambda} \right) & \left( \frac{1}{\lambda} - \lambda \right) \\ \left( \frac{1}{\lambda} - \lambda \right) & \left( \lambda + \frac{1}{\lambda} \right) \end{pmatrix}. \quad (1.53)$$

Первая и третья матрицы в формуле (1.53) аналогичны (1.51) с учетом замены в матрице  $\hat{t}_1$   $\lambda$  на  $-\lambda$  вследствие изменения параметров рассматриваемой задачи в точке  $z=0$  относительно точки  $z=L$  и описывают изменение амплитуд вероятности в точках скачка потенциала  $z=0$  и  $z=L$ . Диагональная матрица  $\hat{t}_2$  описывает изменение этих амплитуд при прохождении электроном области потенциальной ямы. Производя перемножение (сначала  $\hat{t}_2 \hat{t}_1$ , а затем  $\hat{t}_3$  на полученный результат) находим:

$$\hat{T} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} (\lambda + 1/\lambda)^2 e^{ik_2L} - (\lambda - 1/\lambda)^2 e^{-ik_2L} & (\lambda^2 - 1/\lambda^2)(e^{ik_2L} - e^{-ik_2L}) \\ (\lambda^2 - 1/\lambda^2)(e^{-ik_2L} - e^{ik_2L}) & (\lambda + 1/\lambda)^2 e^{-ik_2L} - (\lambda - 1/\lambda)^2 e^{ik_2L} \end{pmatrix}. \quad (1.54)$$

В рассматриваемом случае  $E < W$ , следовательно,  $k_1 = \sqrt{2m_B^*(E - W)}/\hbar$  – мнимая величина, и уравнение (1.52) должно быть записано в виде

$$\begin{pmatrix} i\sqrt{|k_1|/m_B^*}e^{-|k_1|z} \\ i\sqrt{|k_1|/m_B^*}e^{+|k_1|z} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} i\sqrt{|k_1|/m_B^*}e^{-|k_1|z} \\ i\sqrt{|k_1|/m_B^*}e^{+|k_1|z} \end{pmatrix}.$$

Поскольку в подбарьерной области волновая функция электрона должна уменьшаться, и для нее в областях I и III должны быть выполнены граничные условия  $\psi(x, y, z \rightarrow \pm\infty) = 0$ , в формуле (1.52) следует положить  $a_1 = 0$  и  $b_3 = 0$ , что приводит к необходимости выполнения условия  $t_{22} = 0$ . Таким образом, уравнение, позволяющее найти энергетический спектр электронов внутри ямы, выглядит следующим образом:

$$t_{22} = (\lambda + 1/\lambda)^2 e^{-ik_2L} - (\lambda - 1/\lambda)^2 e^{ik_2L} = 0. \quad (1.55)$$

Учитывая, что  $\lambda^2 = -im_W^*k_2/m_B^*|k_1|$ , после несложных преобразований из формулы (1.55) получаем:

$$-2 \left( m_W^*k_2/m_B^*|k_1| - \left( m_W^*k_2/m_B^*|k_1| \right)^{-1} \right) \sin k_2L + 4 \cos k_2L = 0$$

или, переходя к синусу и косинусу половинного угла,

$$\left( \operatorname{tg} \frac{k_2L}{2} + m_W^*k_2/m_B^*|k_1| \right) \cdot \left( \left( m_W^*k_2/m_B^*|k_1| \right)^{-1} - \operatorname{tg} \frac{k_2L}{2} \right) = 0. \quad (1.56)$$

Решение уравнения (1.56) при  $m_W^* = m_B^*$  дает значения уровней размерного квантования для электрона в потенциальной яме, совпадающие с решением уравнения (1.13), и является обобщением последнего на случай различных значений эффективной массы электрона в областях ямы и барьера.

Аналогичным образом может быть найден энергетический спектр электронов в квантовых ямах более сложного вида (например,

ступенчатые квантовые ямы, состоящие из нескольких слоев с различными параметрами). Во всех случаях сначала необходимо построить общую матрицу переноса  $\hat{T}$ , описывающую конкретную структуру, а затем найти уровни размерного квантования из решения уравнения  $t_{22} = 0$ .

Движение электрона в поле потенциального барьера. Пусть электрон налетает на прямоугольный потенциал, показанный на рис. 1.11. В этом случае, рассматривая определенные выше матрицы переноса, для амплитуд вероятности, как и в случае электрона в потенциальной яме, получаем:

$$\begin{aligned} a_3(z_2 + 0) &= t_{11} a_1(z_1 - 0) + t_{12} b_1(z_1 - 0) \\ b_3(z_2 + 0) &= t_{21} a_1(z_1 - 0) + t_{22} b_1(z_1 - 0) \end{aligned} \quad (1.57)$$

где  $t_{jj'}$  – элементы матрицы переноса, трансформирующей волновую функцию в области I,  $\psi_1$  в волновую функцию в области III,  $\psi_3$ , и определяемые произведением трех матриц, аналогично формуле (1.53). Вид этой матрицы полностью совпадает с (1.53), только  $k_1$  и  $m_1^* = m_W^*$  теперь соответствуют области ямы, а  $k_2$  и  $m_2^* = m_B^*$  – области барьера.

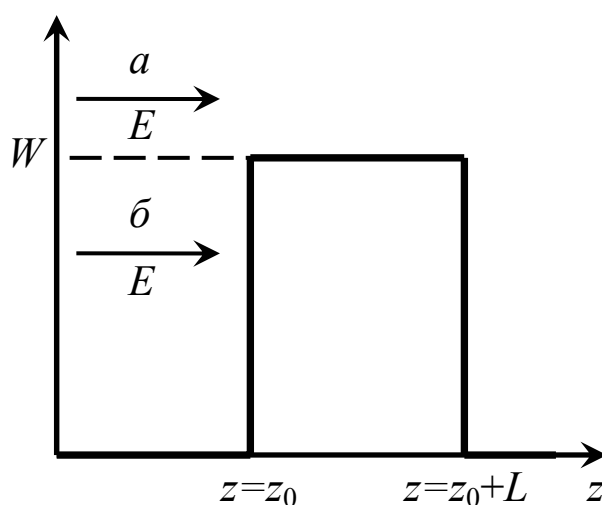


Рис. 1.11. Потенциал, действующий на электрон при надбарьерном туннелировании (а) и проникновении под барьер (б)

Вычислим коэффициенты отражения  $R$  и прохождения  $D$  электрона при движении через потенциальный барьер. Для этого в формуле (1.57) в качестве независимых амплитуд вероятности необходимо выбрать  $a_1$  и  $b_3$ , тогда из формулы (1.57) следует

$$b_1 = U_{11} a_1 + U_{12} b_3, \quad a_3 = U_{21} a_1 + U_{22} b_3,$$

где  $U_{11} = -t_{21}/t_{22}$ ,  $U_{22} = t_{12}/t_{22}$ ,  $U_{12} = U_{21} = 1/t_{22}$ . Очевидно, что

$$R = |U_{11}|^2 = 1/|t_{22}|^2, \quad D = |U_{21}|^2 = |t_{12}/t_{22}|^2. \quad (1.58)$$

Используя найденные выше значения элементов матрицы  $\hat{T}$  (см. формулу (1.54)) можно легко вычислить искомые коэффициенты:

$$D = \frac{1}{|t_{22}|^2} = \left| \frac{4}{e^{-ik_2L}(\lambda + 1/\lambda)^2 - e^{ik_2L}(\lambda - 1/\lambda)^2} \right|^2, \quad (1.59)$$

$$R = \left| \frac{t_{12}}{t_{22}} \right|^2 = \left| \frac{(\lambda^2 - 1/\lambda^2)(e^{ik_2L} - e^{-ik_2L})}{e^{-ik_2L}(\lambda + 1/\lambda)^2 - e^{ik_2L}(\lambda - 1/\lambda)^2} \right|^2. \quad (1.60)$$

В случае вещественного  $k_2$  (т. е. при выполнении условия  $E > W$  – так называемое надбарьерное туннелирование, случай  $a$  на рис. 1.11), из формул (1.59), (1.60) получаем:

$$D = \left( 1 + \frac{k_1^2/(m_W^*)^2 - k_2^2/(m_B^*)^2}{4(k_1 k_2)^2} \sin^2 k_2 L \right)^{-1}, \quad (1.61)$$

$$R = \left( \left( \frac{k_1^2 + k_2^2(m_W^*/m_B^*)^2}{k_1^2 - k_2^2(m_W^*/m_B^*)^2} \right)^2 + \frac{4(k_1 k_2)^2}{k_1^2/(m_W^*)^2 - k_2^2/(m_B^*)^2} \operatorname{ctg}^2 k_2 L \right)^{-1}. \quad (1.62)$$

Отметим, что, во-первых,  $R = 1 - D$ , а во-вторых, коэффициент отражения в выражении (1.62) отличен от нуля, что соответствует квантовому эффекту надбарьерного отражения, отсутствующему в рамках классической механики.

При мнимом  $k_2$  ( $E < W$ , прохождение частицы сквозь потенциальный барьер, случай б на рис. 1.11), получаем формулу для описания туннельного эффекта:

$$D = \left( 1 + \frac{\left( k_1^2 (m_B^*/m_W^*) + |k_2|^2 (m_W^*/m_B^*) \right)^2}{4(k_1|k_2|)^2} \operatorname{sh}^2 |k_2|L \right)^{-1}, \quad (1.63)$$

$$R = 1 - D.$$

В случае барьера большой мощности  $|k_2|L \gg 1$  формула (1.63) дает выражение

$$D \approx \frac{16(k_1|k_2|)^2}{\left( k_1^2 (m_B^*/m_W^*) + |k_2|^2 (m_W^*/m_B^*) \right)^2} e^{-2|k_2|L},$$

показывающее, что вероятность туннелирования электрона сквозь потенциальный барьер экспоненциально убывает с ростом толщины барьера  $L$ .

Движение электрона в периодической сверхрешетке. Пусть электрон движется в сверхрешетке, содержащей  $m$  различных слоев, период чередования которых равен  $d$ . Тогда общая матрица переноса  $\hat{T}$ , соответствующая переходу электрона из точки с координатой  $z_0 - 0$  в точку с координатой  $z_0 + d + 0$  должна быть записана в виде произведения  $2m$  матриц, аналогичных приведенным в выражении (1.53) и описывающих изменение амплитуд вероятностей в точках изменения потенциала сверхрешетки или при движении электрона в области потенциального барьера или потенциальной ямы:  $\hat{T} = \hat{t}_{2m} \hat{t}_{2m-1} \dots \hat{t}_1$ . Поскольку электрон находится в поле периодического потенциала сверхрешетки, его волновые функции в точках  $z_0$  и  $z_0 + d$ , согласно теореме Блоха, могут отличаться только фазовым множителем, определяемым значением его импульса  $q$ :

$$\Psi_q(z_0 + d) = e^{iqd/\hbar} \Psi_q(z_0).$$

Отсюда следует, что

$$\begin{pmatrix} a_{n+m} \\ b_{n+m} \end{pmatrix} = \hat{T} \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix} = e^{iqd/\hbar} \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix}$$

или

$$\begin{pmatrix} t_{11} - e^{iqd/\hbar} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} - e^{iqd/\hbar} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_n \\ b_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (1.64)$$

Равенство (1.64) требует выполнения условия

$$\det \begin{pmatrix} t_{11} - e^{iqd/\hbar} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} - e^{iqd/\hbar} \end{pmatrix} = 0,$$

которое, с учетом унимодулярности матрицы  $\hat{T}$ , приводит к уравнению вида:

$$\frac{1}{2}(t_{11} + t_{22}) = \cos(qd/\hbar). \quad (1.65)$$

Выражение (1.65) и является дисперсионным уравнением, решение которого определяет спектр значений энергии в периодической сверхрешетке. Конкретный вид этого уравнения зависит от параметров и числа образующих сверхрешетку слоев.

Проиллюстрируем результаты, которые могут быть получены на основании изложенного подхода, на примере сверхрешетки, показанной на рис. 1.8. В этом случае матрица переноса, трансформирующая волновую функцию электрона и точки  $z_0 = -b$  в точку  $z_1 = a$  должна быть записана в виде:

$$\hat{T} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} (\lambda + 1/\lambda)^2 e^{ik_2 b} - (\lambda - 1/\lambda)^2 e^{-ik_2 b} & (\lambda^2 - 1/\lambda^2)(e^{ik_2 b} - e^{-ik_2 b}) \\ (\lambda^2 - 1/\lambda^2)(e^{-ik_2 b} - e^{ik_2 b}) & (\lambda + 1/\lambda)^2 e^{-ik_2 b} - (\lambda - 1/\lambda)^2 e^{ik_2 b} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik_1 a} & 0 \\ 0 & e^{-ik_1 a} \end{pmatrix}.$$

Первая матрица описывает изменение волновой функции в двух точках скачка потенциала ( $-b$  и  $0$ ), а также при его движении в области барьера и по виду совпадает с выражением (1.54) при замене  $L$  на  $b$ . Вторая матрица описывает свободное движение электрона в



области отсутствия потенциального барьера ( $z = 0 \div a$ ). В результате, элементы матрицы  $\hat{T}$  имеют следующий вид:

$$t_{11} = \frac{1}{4} \left[ (\lambda + 1/\lambda)^2 e^{ik_2 b} - (\lambda - 1/\lambda)^2 e^{-ik_2 b} \right] e^{ik_1 a},$$

$$t_{22} = \frac{1}{4} \left[ (\lambda + 1/\lambda)^2 e^{-ik_2 b} - (\lambda - 1/\lambda)^2 e^{ik_2 b} \right] e^{-ik_1 a}.$$

Учитывая, что в рассматриваемом случае  $k_1$  – вещественная величина, а  $k_2$  – мнимая, можно записать  $\lambda^2 = i m_W^* |k_2| / m_B^* k_1$ . После соответствующих преобразований получаем:

$$t_{11} = -i e^{ik_1 a} \frac{|\lambda|^4 - 1}{2|\lambda|^2} \operatorname{sh} |k_2| b + e^{ik_1 a} \operatorname{ch} |k_2| b, \quad t_{22} = t_{11}^*.$$

В результате,

$$\frac{1}{2} (t_{11} + t_{22}) = \frac{|\lambda|^4 - 1}{2|\lambda|^2} \sin k_1 a \cdot \operatorname{sh} |k_2| b + \cos k_1 a \cdot \operatorname{ch} |k_2| b. \quad (1.66)$$

Подставляя (1.66) в формулу (1.65) окончательно получаем дисперсионное уравнение для нахождения энергетического спектра рассматриваемой сверхрешетки:

$$\cos(q(a+b)/\hbar) = \frac{|k_2|^2 m_W^* / m_B^* - k_1^2 m_B^* / m_W^*}{2k_1 |k_2|} \sin k_1 a \cdot \operatorname{sh} |k_2| b + \cos k_1 a \cdot \operatorname{ch} |k_2| b. \quad (1.67)$$

Видно, что при  $m_W^* = m_B^*$  это уравнение с точностью до обозначений совпадает с уравнением (1.43), полученным при анализе энергетического спектра сверхрешетки, показанной на рис. 1.8, в рамках модели Кронига-Пенни.

## 1.6. ПЛОТНОСТЬ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ В СИСТЕМАХ С ПОНИЖЕННОЙ РАЗМЕРНОСТЬЮ

Как известно, для количественного описания свойств системы носителей заряда фундаментальное значение имеют две функции – функция распределения Ферми-Дирака  $f(E)$  и функция плотности электронных состояний  $g(E)$ . Вид первой из них:

$$f(E) = \frac{1}{1 + e^{\frac{E-\mu}{k_B T}}}. \quad (1.68)$$

зависит только от типа рассматриваемых частиц (фермионы или бозоны) и никак не изменяется при переходе к рассмотрению электронов не в объемных, а в квантоворазмерных структурах.

С другой стороны, функция плотности электронных состояний сильно зависит от типа рассматриваемого объекта. Для объемных кристаллов в случае стандартной зоны (квадратичный закон дисперсии, отсутствие анизотропии) она определяется как [4]

$$g(E) = \frac{4\pi}{h^3} (2m^*)^{3/2} E^{1/2}. \quad (1.69)$$

Естественно ожидать, что при переходе к системам с пониженной размерностью из-за появления дискретной составляющей энергетического спектра вид функции  $g(E)$  может существенно измениться. Ниже мы получим общее выражение, которое может быть использовано для нахождения функции плотности состояний в любом случае, а затем вычислим ее значения для систем с различной размерностью.

В общем случае значение функции плотности состояний при энергии  $E$  определяется числом разрешенных для электрона состояний  $dZ$ , находящихся в единице объема (площади, длины, в зависимости от размерности системы) кристалла и в интервале энергий  $E \div E + dE$ :  $g(E) = \frac{dZ}{dE}$ . Строго говоря, энергетический спектр

электронов в кристаллах всегда является дискретным (рис. 1.12, *а*), хотя масштаб этой дискретности и зависит от геометрических размеров рассматриваемого объекта. Поэтому при малых приращениях энергии можно в первом приближении считать, что число электронных состояний увеличивается скачком при достижении каждого из разрешенных уровней энергии (рис. 1.12, *б*). Следовательно, функция  $g(E)$  представляет собой набор  $\delta$ -функций, определенных при разрешенных для электрона значениях энергии (рис. 1.12, *в*).

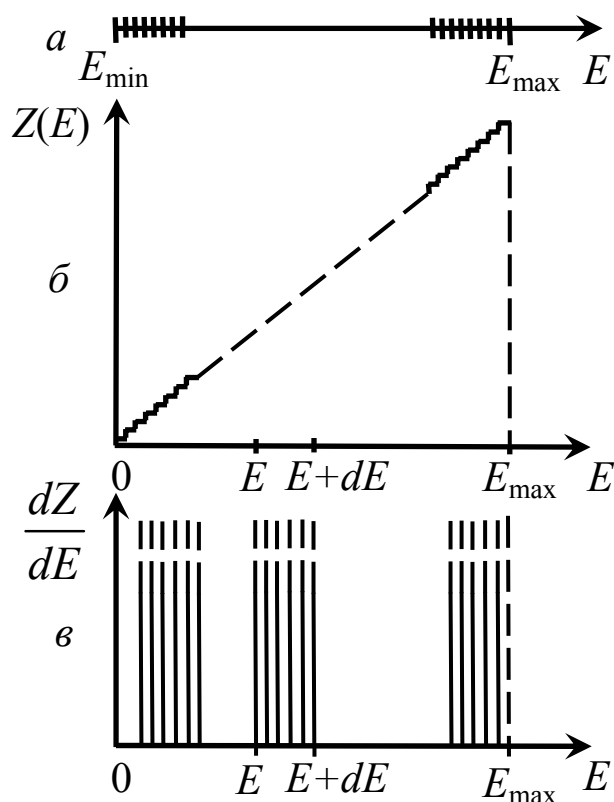


Рис. 1.12. Разрешенные значения энергии (*а*), изменение числа состояний (*б*) и вид функции плотности состояний (*в*) в кристаллах

Будем характеризовать состояние электрона набором квантовых чисел  $k_x, k_y, k_z$  в пространстве волновых векторов  $\mathbf{k}$ , значения которых и определяют спектр возможных значений энергии. При этом необходимо помнить, что в одной ячейке  $\mathbf{k}$ -пространства может находиться два электрона с противоположно направленными

спинами, т. е. к суммированию по  $\mathbf{k}$  добавляется суммирование по направлению спина, увеличивающее значение  $g$  в два раза. Тогда нормированная на единицу объема функция плотности состояний должна быть записана в виде:

$$g(E) = \frac{1}{V} \sum_{S\uparrow, S\downarrow} \sum_{\mathbf{k}} \delta(E - E_{\mathbf{k}}) = \frac{1}{V} \sum_{S\uparrow, S\downarrow} \sum_{k_x} \sum_{k_y} \sum_{k_z} \delta(E - E_{\mathbf{k}}), \quad (1.70)$$

где  $V$  – объем образца, а суммирование ведется по всем возможным значениям волнового вектора и двум возможным значениям спина.

Если в одном из направлений дискретность энергетического спектра очень мала и его можно считать квазинепрерывным, то суммирование по соответствующей проекции волнового вектора  $k_i$  в формуле (1.70) может быть заменено на интегрирование с учетом размера фазового объема в  $k$ -пространстве:

$$\sum_{k_i} \Rightarrow \frac{L_i}{2\pi} \int dk_i = \frac{L_i}{2\pi\hbar} \int dp_i, \quad (1.71)$$

где  $L_i$  – размер кристалла в данном направлении,  $p_i$  – соответствующая этому направлению компонента импульса. При этом по тем направлениям, в которых энергетический спектр является дискретным, суммирование в формуле (1.70) должно сохраняться.

Рассмотрим применение описанного подхода для вычисления функции  $g(E)$  в 3D, 2D, 1D структурах и периодических сверхрешетках. При этом во всех случаях будем считать, что в направлении, в котором движение электрона остается свободным, энергетический спектр является параболическим.

Трехмерный случай. В этом случае энергетический спектр выглядит как  $E_p = p^2/2m^*$ , а полный набор квантовых чисел состоит из возможных значений трех проекций вектора импульса и спинового квантового числа. В результате, формула (1.70) с учетом выражения (1.71) может быть записана в виде:

$$g(E) = \frac{1}{V} \sum_{s\uparrow, s\downarrow} \sum_{\mathbf{k}} \delta(E - E_{\mathbf{k}}) = \sum_{s\uparrow, s\downarrow} \int \frac{d^3 \mathbf{p}}{(2\pi\hbar)^3} \delta(E - E_p).$$

Переходя к сферическим координатам и учитывая суммирование по направлению спина, а затем выражая значение импульса через значение энергии и учитывая свойства  $\delta$ -функции, имеем:

$$\begin{aligned} g(E) &= 8\pi \int \frac{p^2 dp}{(2\pi\hbar)^3} \delta(E - E_p) = \\ &= \frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^3} (2m^*)^{3/2} \int \sqrt{E_p} \delta(E - E_p) dE_p = \frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^3} (2m^*)^{3/2} E^{1/2}. \end{aligned} \quad (1.72)$$

Видно, что выражение (1.72) совпадает с (1.69). Вид трехмерной функции плотности состояний показан на рис. 1.13, *а*. При этом ее размерность в 3D-системах есть  $\text{эВ}^{-1}\text{см}^{-3}$ .

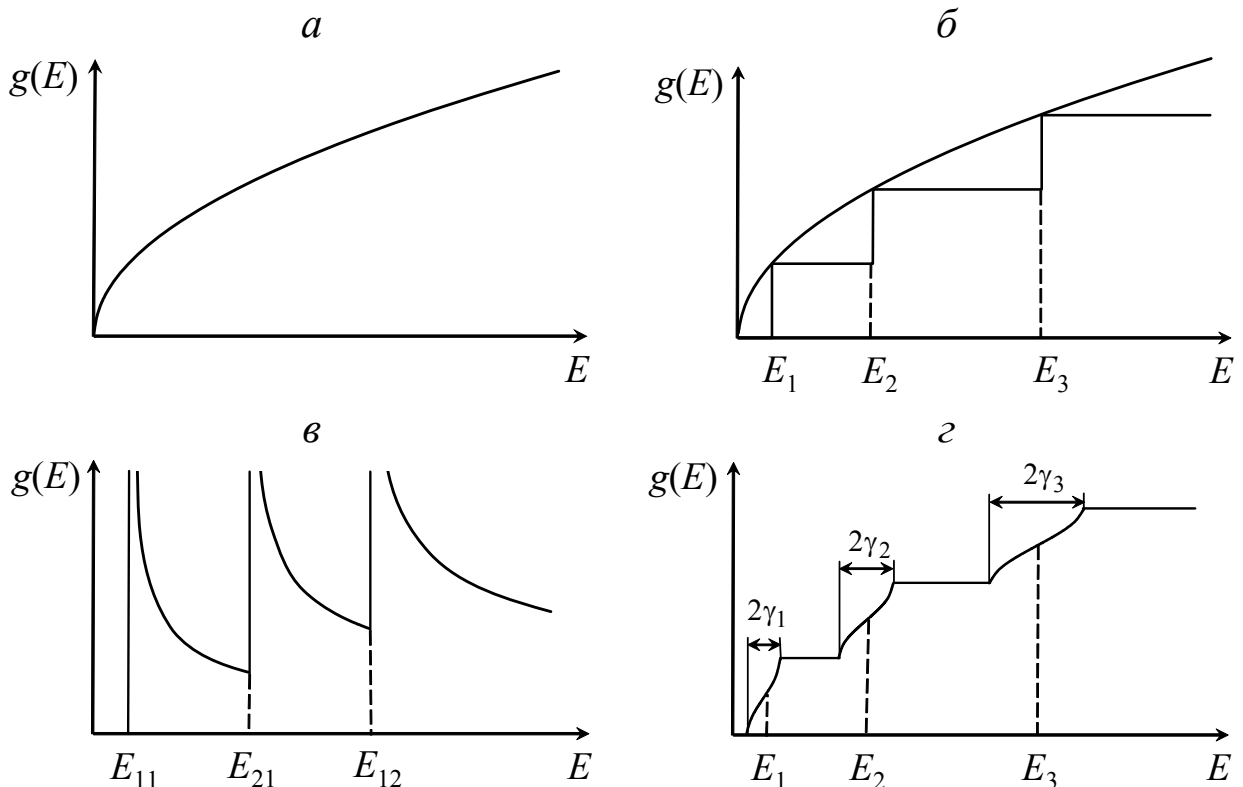


Рис. 1.13. Функция плотности электронных состояний в трехмерных (*а*), двумерных (*б*), одномерных (*в*) системах и в периодической сверхрешетке (*г*)

Двумерный случай. Для двумерной системы энергетический спектр носителей заряда выглядит следующим образом (см. формулу (1.35)):  $E_{n,p_x,p_y} = E_n + p_x^2/2m^* + p_y^2/2m^* = E_n + E_p$ , где  $E_n$  – уровни энергии размерного квантования, определяемые формой потенциальной ямы (см. п. 2.1, для бесконечной прямоугольной потенциальной ямы  $E_n$  определяется выражением (1.6)). Квантовыми числами являются две проекции вектора импульса, номер квантованного энергетического уровня и спиновое квантовое число. В этом случае при вычислении функции  $g(E)$  в формуле (1.70) можно перейти к интегрированию по двум координатам  $(k_x, k_y)$ , а по  $k_z$  необходимо проводить суммирование. При этом значение  $g$  будет определяться как число состояний, отнесенное к единице площади, поэтому  $V$  в (1.70) должно быть заменено на  $S$ . Переходя к интегрированию в полярных координатах, имеем:

$$\begin{aligned}
 g(E) &= \frac{1}{S} \sum_{S\uparrow, S\downarrow} \sum_n \sum_{k_x, k_y} \delta(E - E_{n,k_x,k_y}) = 2 \sum_n \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} \int dp_x dp_y \delta(E - E_{n,p_x,p_y}) = \\
 &= 2 \sum_n \frac{1}{(2\pi\hbar)^2} 2\pi \int p dp \delta(E - E_{n,p_x,p_y}) = \frac{4\pi m^*}{(2\pi\hbar)^2} \int dE_p \delta(E - E_n - E_p) = \\
 &= \sum_n \frac{4\pi m^*}{(2\pi\hbar)^2} = \sum_n \frac{m^*}{\pi\hbar^2} = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} \sum_n \Theta(E - E_n), \tag{1.72}
 \end{aligned}$$

где  $\Theta(x)$  – функция Хевисайда, равная единице при  $x < 0$  и нулю при  $x > 0$ .

Таким образом, в 2D системах плотность состояний остается постоянной при изменении энергии в диапазоне между уровнями размерного квантования  $E_n$  и изменяется скачком на величину  $m^*/\pi\hbar^2$  при достижении каждого из них (рис. 1.13, б). Ее размерность в этом случае –  $\text{эВ}^{-1}\text{см}^{-2}$ .

Одномерный случай. В этом случае энергетический спектр определяется выражением  $E_{n_1,n_2,p_x} = E_{n_1,n_2} + p_x^2/2m^*$ , где  $E_{n_1,n_2}$  –

квантованные уровни энергии для одномерной системы (см. (1.37)). Квантовыми числами являются два номера уровней ( $n_1$  и  $n_2$ ), значение импульса в направлении  $x$  и спиновое квантовое число. Функция  $g(E)$  определяется как число состояний, отнесенное к единице длины квантовой нити, т. е.  $V$  в формуле (1.70) должно быть заменено на  $L$ . Действуя аналогично предыдущим случаям, имеем:

$$\begin{aligned}
 g(E) &= \frac{1}{L} \sum_{S\uparrow, S\downarrow} \sum_{n_1, n_2} \sum_{k_x} \delta(E - E_{n_1, n_2, k_x}) = 2 \sum_{n_1, n_2} \frac{1}{2\pi\hbar} \int dp_x \delta(E - E_{n_1, n_2, p_x}) = \\
 &= \frac{1}{\pi\hbar} \sum_{n_1, n_2} 2 \int_0^{p_{\max}} dp_x \delta(E - E_{n_1, n_2, p_x}) = \frac{2(2m^*)^{1/2}}{2\pi\hbar} \sum_{n_1, n_2} \int \frac{dE_p}{\sqrt{E_p}} \delta(E - E_{n_1, n_2} - E_p) = \\
 &= \frac{2\sqrt{2m^*}}{2\pi\hbar} \sum_n \frac{1}{\sqrt{E - E_{n_1, n_2}}}. \tag{1.73}
 \end{aligned}$$

Таким образом, в 1D-системах плотность состояний испытывает резкий скачок при достижении каждого из уровней  $E_{n_1, n_2}$ , а затем уменьшается по закону  $\sqrt{E}$  в пределах каждой из подзон размерного квантования. При достижении следующей подзоны вновь происходит резкий скачок, а при дальнейшем увеличении энергии вклад этой подзоны размерного квантования в значение  $g(E)$  суммируется со вкладом от предыдущей подзоны (рис. 1.13, в). Размерность одномерной плотности состояний есть эВ<sup>-1</sup>см<sup>-1</sup>.

Таким образом, понижение размерности системы приводит к двум принципиальным изменениям в функции плотности электронных состояний. Во-первых, на зависимости  $g(E)$  появляются резкие особенности в виде скачков при достижении каждого из уровней размерного квантования. Во-вторых, характер зависимости функции  $g(E)$  в пределах каждой из подзон размерного квантования изменяется – для 3D-систем  $g \propto E^{1/2}$ , для 2D –  $g = \text{const}(E)$ , для 1D –  $g \propto E^{-1/2}$ . Очевидно, что эти особенности оказывают существенное

воздействие на все электронные свойства систем с пониженной размерностью.

Для 0D-систем (квантовых точек) энергетический спектр является полностью дискретным. В этом случае значение функции плотности состояний увеличивается скачком при достижении каждого из квантованных уровней. Величина этих скачков равна кратности вырождения соответствующего уровня.

Проведем количественное сравнение значений функции  $g(E)$  для 3D- и 2D-систем. Для этого сравним значение  $g(E)$  в 3D-системе ( $g^{3D}$ ) на уровне, соответствующем, например, первому уровню размерного квантования в 2D-случае с двумерной плотностью состояний  $g^{2D}$  при этом же значении энергии. Поскольку размерность этих двух функций различна, вычислим величину  $L \cdot g^{3D}(E_1)$ . Воспользовавшись выражением для уровней  $E_n$  в случае бесконечной прямоугольной потенциальной ямы (1.6), получим:

$$L \cdot g^{3D}(E_1) = L \frac{4\pi}{h^3} (2m^*)^{3/2} \frac{\pi\hbar}{\sqrt{2m^*} L} = \frac{m^*}{\pi\hbar^2} = g^{2D}(E_1 \leq E < E_2).$$

Таким образом, значение функции плотности электронных состояний в двумерной системе всегда ниже, чем в трехмерной, за исключением случая  $E = E_n$ , где две эти величины сравниваются.

В заключение данного параграфа получим выражение для плотности электронных состояний в периодической сверхрешетке, энергетический спектр которой определяется выражением (1.45), при этом будем считать, что  $\eta_n = 0$ . Рассмотрим сначала только нижнюю минизону. Тогда

$$E_p = p_{\parallel}^2 / 2m^* + E_1 - \gamma_1 \cos(p_z d / \hbar) = E_{\parallel} + E_1 - \gamma_1 \cos(p_z d / \hbar),$$

где  $p_{\parallel} = \sqrt{p_x^2 + p_y^2}$ . Подставляя это выражение в формулу (1.70) и переходя к интегрированию по всем трем направлениям импульса, а затем к полярным координатам для  $p_{\parallel}$ , получаем:



$$\begin{aligned}
g(E) &= 2 \int \frac{d^2 p_{\parallel}}{(2\pi\hbar)^2} \int_{-\pi/a\hbar}^{\pi/a\hbar} \frac{dp_z}{2\pi\hbar} \delta(E - Ep) = \\
&= \frac{m^*}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\pi/a\hbar} dp_z \int_0^{\infty} dE_{\parallel} \delta(E - E_{\parallel} - E_1 + \gamma_1 \cos(p_z d/\hbar)).
\end{aligned}$$

Вводя новую переменную  $E_B = -\gamma_1 \cos(p_z d/\hbar)$ , получаем:

$$g(E) = \frac{m^*}{\pi^2 \hbar^2 d} \int_{-\gamma_1}^{\gamma_1} \frac{dE_B}{\sqrt{\gamma_1^2 - E_B^2}} dE_B \int_0^{\infty} dE_{\parallel} \delta(E - E_{\parallel} - E_1 - E_B). \quad (1.74)$$

Второй интеграл в (1.74) равен единице, если  $\delta$ -функция определена в пределах интегрирования, т.е.  $E - E_1 - E_B > 0$ , в противном случае он равен нулю. Это условие может накладывать ограничения на пределы интегрирования в первом интеграле. Учитывая это обстоятельство, а также то, что величина  $E_B$  лежит в пределах  $-\gamma_1 \div +\gamma_1$ , значение  $g(E)$  будет определяться следующим образом.

- при  $E < E_1 - \gamma_1$  условие  $E - E_1 - E_B > 0$  не выполняется, поэтому  $g(E) = 0$ ;
- при  $E > E_1 + \gamma_1$  условие  $E - E_1 - E_B > 0$  выполняется при любом

$E_B$ , второй интеграл в (1.74) равен единице, и

$$g(E) = \frac{m^*}{\pi^2 \hbar^2 d} \int_{-\gamma_1}^{\gamma_1} \frac{dE_B}{\sqrt{\gamma_1^2 - E_B^2}} dE_B = \frac{m^*}{\pi^2 \hbar^2 d} \arcsin \frac{E_B}{\gamma_1} \Big|_{-\gamma_1}^{+\gamma_1} = \frac{m^*}{\pi^2 \hbar^2 d};$$

- при  $E_1 - \gamma_1 < E < E_1 + \gamma_1$  условие  $E - E_1 - E_B > 0$  выполняется только при  $E_B = -\gamma_1 \div E - E_1$ , поэтому

$$g(E) = \frac{m^*}{\pi^2 \hbar^2 d} \int_{-\gamma_1}^{E-E_1} \frac{dE_B}{\sqrt{\gamma_1^2 - E_B^2}} dE_B = \frac{m^*}{\pi^2 \hbar^2 d} \left[ \arcsin \frac{E - E_1}{\gamma_1} + \frac{\pi}{2} \right].$$

Обобщая полученный результат на случай нескольких минизон, для функции плотности состояний в сверхрешетке, отнесенной не к единице объема, а, как и в 2D-случае, к единице площади, получаем:

$$g(E) = \begin{cases} \frac{m^*}{\pi\hbar^2} \left[ \frac{1}{\pi} \arcsin \frac{E - E_n}{\gamma_n} + n - \frac{1}{2} \right] & \text{при } E_n - \gamma_n < E < E_n + \gamma_n \\ \frac{m^*}{\pi\hbar^2} n & \text{при } E_n + \gamma_n < E < E_{n+1} - \gamma_{n+1} \end{cases} \quad (1.75)$$

Зависимость функции плотности состояний в сверхрешетке от энергии приведена на рис. 1.13, з. В областях вне разрешенных минизон она совпадает с плотностью состояний в 2D-системах, а внутри этих минизон изменяется по полученному выше закону.

## 1.7. СТАТИСТИКА НОСИТЕЛЕЙ ЗАРЯДА

Концентрация электронов  $n$  в кристаллах определяется, прежде всего, энергетическим положением уровня электрохимического потенциала  $\mu$ . При этом ее значение может быть достаточно однозначно определено на основе анализа тех или иных экспериментальных данных. С другой стороны, электрохимический потенциал является термодинамическим параметром и не может быть определен экспериментально (по крайней мере, простыми способами). В то же время, величина  $\mu$  является определяющей при описании и анализе различных эффектов. По этой причине определение вида зависимости электрохимического потенциала от концентрации электронов (и, естественно, от температуры, а также различных параметров носителей заряда) является главной задачей статистики. В общем случае равновесная (в отсутствие каких-либо внешних воздействий) концентрация электронов может быть найдена по формуле:

$$n = \int_0^{\infty} g(E) f(E) dE \quad (1.76)$$

и, следовательно, зависит от вида функции  $g(E)$ . Используя найденные в предыдущем параграфе ее значения, из (1.76) имеем:

$$n = \frac{4\pi(2m^*k_B T)^{3/2}}{h^3} F_{1/2}(\mu^*) \quad (1.77)$$

и

$$n = \frac{\sqrt{2m^*}}{\pi\hbar} (k_B T)^{1/2} F_{-1/2}(\mu^* - E_{n_1, n_2} / k_B T) \quad (1.78)$$

для 3D- и 1D-систем, соответственно, где  $\mu^* = \mu / k_0 T$  – приведенный электрохимический потенциал, а  $F_S$  – интегралы Ферми соответствующего индекса, определяемые выражением

$$F_S(\mu^*) = \int_0^\infty \frac{x^S}{1 + e^{x - \mu^*}} dx.$$

Отметим, что выражение (1.78) справедливо в случае заполнения только одной подзоны размерного квантования, уровень энергии дна которой определяется квантовыми числами  $n_1$  и  $n_2$ . В случае заполнения следующих подзон концентрация носителей заряда в каждой из них вычисляется по аналогичной формуле, после чего все найденные значения концентраций должны быть просуммированы.

Поскольку интегралы Ферми аналитически не вычисляются, выражения (1.77) и (1.78) дают неявную связь концентрации и электрохимического потенциала. Только в частных случаях, когда для вычисления концентрации возможно использование классической статистики или приближения Зоммерфельда, зависимость  $n(\mu)$  может быть получена в явном виде.

В отличие от этих случаев, для двумерного электронного газа возможно получение аналитического выражения, описывающее зависимость концентрации от электрохимического потенциала, поскольку, как было показано в предыдущем параграфе, значение функции плотности состояний (в пределах каждой из подзон размерного квантования) не зависит от энергии носителей заряда. Будем считать, что все носители заряда находятся только в первой

подзоне размерного квантования. Тогда для их концентрации  $n_S$  с учетом (1.72) имеем\*

$$n_S = \int_0^{\infty} g(E) f(E) dE = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} \int_{E_1}^{\infty} \frac{1}{e^{\frac{E-\mu}{k_B T} + 1}} dE. \quad (1.79)$$

Вычисляя значение этого интеграла путем замены переменных, окончательно получаем:

$$n_S = \frac{m^* k_B T}{\pi \hbar^2} \ln(1 + e^{\frac{\mu - E_1}{k_B T}}) = N_c \ln(1 + e^{\frac{\mu - E_1}{k_B T}}), \quad (1.80)$$

где  $N_c = \frac{m^* k_B T}{\pi \hbar^2}$  – введенное по аналогии с трехмерным случаем значение эффективной плотности состояний у дна зоны проводимости. Формулу (1.80) можно легко преобразовать к другому виду, выразив уровень химического потенциала через значение концентрации:

$$\mu = E_1 + k_B T \ln(e^{n_S/N_c} - 1). \quad (1.81)$$

Рассмотрим предельные случаи сильного вырождения и классической статистики. При этом по аналогии с трехмерным случаем в качестве критерия вырождения используем соотношение между  $n_S$  и  $N_c$ .

Классическая статистика может применяться, если  $n_S \ll N_c$ , при этом значение  $\mu$  отрицательно и  $|\mu^*| \gg 1$ . Следовательно, значение экспоненты в формуле (1.80) мало, и разлагая логарифм в ряд, имеем:

$$n_S = N_c e^{\frac{\mu - E_1}{k_B T}} \quad (1.82)$$

---

\* Заметим, что в этом случае имеется в виду поверхностная концентрация, поэтому ее размерность (аналогично функции плотности состояний) есть  $\text{см}^{-2}$ , а не  $\text{см}^{-3}$ , как для объемных кристаллов.

или

$$\mu = E_1 + k_B T \ln \left( \frac{n_S}{N_c} \right). \quad (1.83)$$

Выражения (1.82) и (1.83) аналогичны соответствующим выражениям для трехмерного электронного газа с той разницей, что значение  $N_c$  в этих случаях определяется по-разному, а значение  $\mu$  в 2D-случае отсчитывается не от нуля (совпадающего для электронного полупроводника с дном зоны проводимости), а от положения первого уровня размерного квантования.

Вырожденная статистика реализуется, если  $n_S \gg N_c$ . В этом случае величина  $\mu^*$  большая и положительная, значение экспоненты в формуле (1.80) велико, и мы получаем:

$$n_S = \frac{m^*}{\pi \hbar^2} (\mu - E_1), \quad (1.84)$$

$$\mu = E_1 + \frac{\pi \hbar^2 n_S}{m^*}. \quad (1.85)$$

Как видно из формул (1.84), (1.85) при наличии вырождения уровень электрохимического потенциала и концентрация носителей заряда в 2D-системах связаны между собой по линейному закону, т.е. по сравнению с 3D-случаем (где, как известно,  $\mu \propto n^{2/3}$ ) значение  $\mu$  в двумерных системах сильнее изменяется при варьировании концентрации носителей заряда.

Отметим следующее обстоятельство. Поскольку эффективная плотность состояний  $N_c$  пропорциональна первой степени температуры в 2D-случае и  $T^{3/2}$  – в 3D, при одной и той же концентрации носителей заряда вырождение в двумерных системах снимается при более высоких температурах. Это означает, что для реализации вырожденной статистики в двумерных системах не требуются слишком высокие концентрации, другими словами,

условие вырожденности электронного газа может достаточно легко выполняться уже при комнатной температуре. Так, например, для электронного GaAs ( $m^*=0,07m_0$ ) при  $T=300$  К вырождение начинается ( $n_S = N_c$ ) уже при  $n_S \approx 10^{-12} \text{ см}^{-2}$ . Таким образом, электронный газ в 2D-системах достаточно часто оказывается вырожденным.

В заключение отметим следующее обстоятельство. Выше мы рассматривали случай заполнения только первой подзоны размерного квантования. Если состояние системы таково, что заполняется несколько подзон, для нахождения полной концентрации необходимо суммировать ее значения, определенные для каждой из этих подзон. При этом для любой подзоны значение  $n_S$  вычисляется по формулам, аналогичным формулам (1.82), (1.84) с заменой в них уровня энергии  $E_l$  на уровень дна соответствующей подзоны  $E_n$ . В этой связи возникает вопрос, каков критерий, при выполнении которого происходит заполнение только нижней подзоны размерного квантования. В случае вырожденного электронного газа только первая подзона будет заполнена, если  $\mu < E_2$ . Для бесконечной прямоугольной потенциальной ямы, используя формулы (1.85) и (1.6), получаем критерий заполнения только одной (нижней) подзоны размерного квантования в виде:

$$n_S L^2 < \frac{3\pi}{2}. \quad (1.86)$$

Таким образом, варьируя либо концентрацию носителей заряда (путем легирования), либо геометрический размер ямы, мы можем изменять количество заполненных электронами подзон размерного квантования. Следовательно, при фиксированной концентрации положение уровня электрохимического потенциала существенно зависит от геометрического размера структуры, приближаясь при ее большой толщине к значению, определяемому выражением  $n(\mu)$  для объемного кристалла.

## **ГЛАВА 2. ФОНОНЫ В СИСТЕМАХ С ПОНИЖЕННОЙ РАЗМЕРНОСТЬЮ**

### **2.1. ВВЕДЕНИЕ**

Пространственное ограничение движения электрона в области, линейные размеры которой сравнимы с длиной волны де-Бройля, приводит к эффекту размерного квантования – энергетический спектр электрона существенно меняется. Это явление подробно описано в главе 1. Можно сказать, что эффект размерного квантования обусловлен тем, что волновая функция электрона должна удовлетворять определенным граничным условиям, возникающим при пространственном ограничении его движения.

В кристалле наряду с электронами и дырками существуют и другие квазичастицы, например, фононы. Спектр фононных мод определяется силами связей и параметрами решетки кристалла. Поэтому в различных материалах спектр фононных мод различен. Вследствие этого наличие границ между различными материалами должно приводить к новым граничным условиям для фононных мод и к модификации их спектров. 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.

### **2.2. ФОНОНЫ В ОБЪЕМНЫХ КРИСТАЛЛАХ**

Физика колебаний кристаллической решетки в объемных материалах изложена в ряде монографий и учебников (см., например, [5]), поэтому приведем лишь краткие сведения из этой области.

Колебания атомов кристаллической решетки можно описывать смещениями атомов из положения равновесия, однако этот подход слишком громоздок и неудобен из-за большого количества атомов. Оказывается возможным перейти к другим координатам – заменить осцилляции отдельных атомов так называемыми *нормальными модами*, которые уже не зависят друг от друга. Энергии этих нормальных мод (представляющих собой волны смещений атомов) квантуются, и каждый квант колебаний решетки называется *фононом*. Фононы, как квазичастицы или элементарные возбуждения, характеризуются волновым вектором  $\mathbf{q}$  и частотой  $\omega$  (аналогично энергии фотона энергия фонона равна  $\hbar\omega_q$ ). Фононы являются бозонами, среднее число фононов, возбужденных в моде  $\omega(\mathbf{q})$ , определяется распределением Бозе-Эйнштейна:

$$N(\omega_q) = \frac{1}{\exp\left(\frac{\hbar\omega_q}{k_B T}\right) - 1}. \quad (2.1)$$

Из (2.1) следует, что при высоких температурах ( $k_B T \gg \hbar\omega_q$ ) число фононов прямо пропорционально  $k_B T$ .

Для кристаллов, в примитивной элементарной ячейке которых находится два атома (например, Si – решетка типа алмаза, GaAs – решетка типа цинковой обманки), имеется шесть фононных ветвей (типов зависимости  $\omega(\mathbf{q})$ ). Вдоль направлений высокой симметрии (таких как [100] и [111] в Si и GaAs) фононы можно классифицировать как поперечные (T, transverse) и продольные (L, longitudinal), в зависимости от того перпендикулярны или параллельны смещения атомов решетки направлению волнового вектора фонона, и число фононных ветвей уменьшается до четырех (ветви поперечных колебаний в этом случае двукратно вырождены). На рис. 2.1 приведены зависимости частоты фононов от волнового вектора для GaAs.



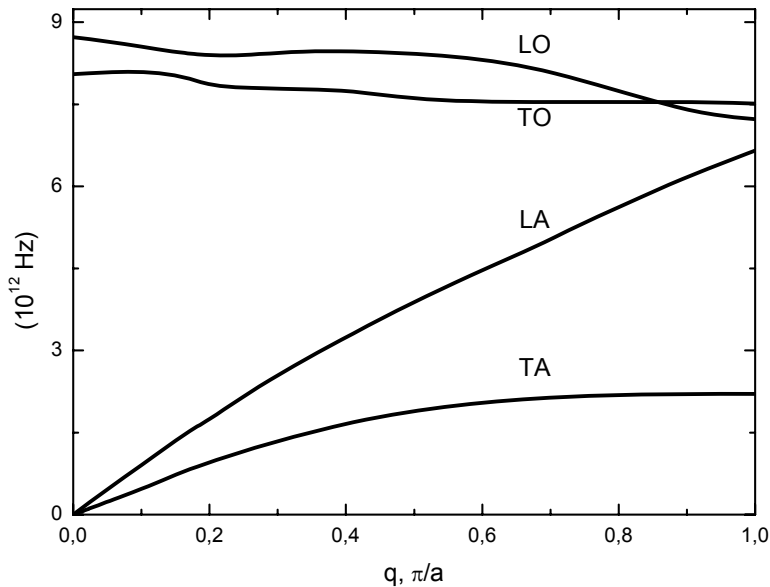


Рис. 2.1. Фононные ветви в GaAs (зависимости частоты фононов от волнового вектора) для направления волнового вектора [100].  
 LA, TA – продольные и поперечные акустические фононы,  
 LO, TO – продольные и поперечные оптические фононы [6]

Периодичность кристаллической структуры приводит к тому, что физически различимые значения волновых векторов ограничены в  $\mathbf{k}$ -пространстве так называемой *зоной Бриллюэна*. Первая зона Бриллюэна для структуры цинковой обманки в направлении [100], например, ограничена значениями  $-\pi/a < q < \pi/a$ , где  $a$  – постоянная решетки. На рис. 2.1 можно различить два типа фононов – *акустические* и *оптические*. Частота акустических фононов равна нулю в центре зоны Бриллюэна (при  $q \rightarrow 0 \omega(\mathbf{q}) \propto q$ ) и увеличивается к ее краю, оптические же фононы имеют во всей зоне Бриллюэна высокую частоту, слабо зависящую от волнового вектора.

В длинноволновом пределе  $q \approx 0$  оказывается возможным сопоставить акустическим и оптическим фононам различные типы колебаний атомов решетки. Длинноволновые акустические фононы соответствуют колебаниям атомов решетки, при которых оба атома из элементарной ячейки колеблются в фазе (их смещения происходят в одну сторону). Оптическим фононам соответствуют противофазные

колебания атомов в элементарной ячейке (их смещения из положения равновесия имеют разный знак). Такие акустические и оптические фононы называются *деформационными*. В кристаллах с долей ионной связи, к которым относится, например, GaAs, фононы называются *полярными*. В таких кристаллах оптические фононы (или оптические колебания решетки) приводят к возникновению электрической поляризации, в результате чего эти фононы могут взаимодействовать с внешним оптическим излучением. С последним обстоятельством связано название этих фононов – оптические.

### 2.3. ФОНОНЫ В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ

Фононные спектры в различных кристаллах, как мы уже отмечали, отличаются. Для сравнения на рис. 2.2 приведены спектры продольных фононов для GaAs и AlAs (эта пара полупроводников или твердых растворов на их основе часто используется для создания гетероструктур).

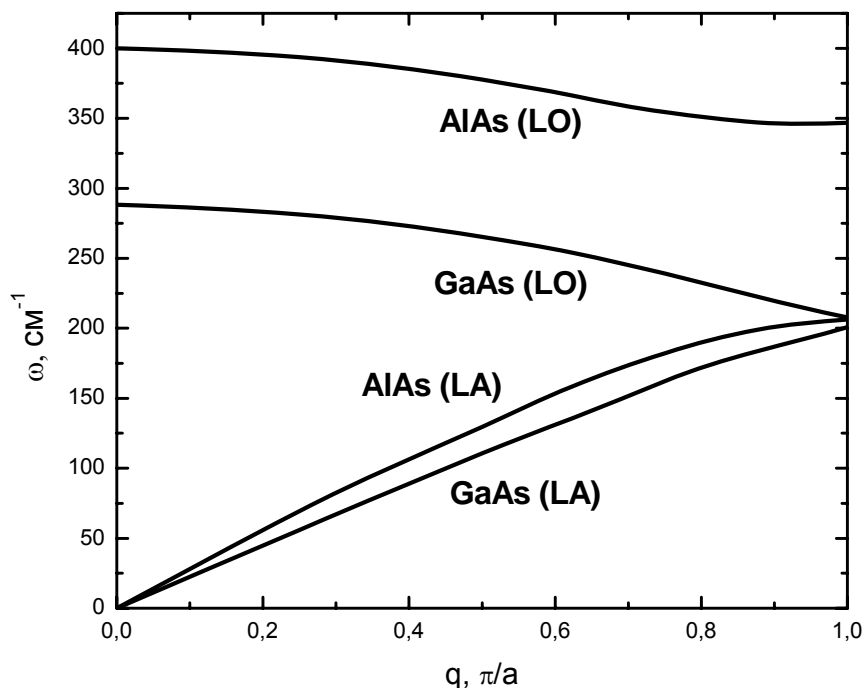


Рис. 2.2. Продольные фононы в GaAs и AlAs [7]

Различные зависимости частоты оптических и акустических фононов от их волнового вектора приводят к различному поведению этих фононов в гетероструктурах.

Можно выделить несколько типов гетероструктур, в которых представляет интерес рассмотреть особенности поведения колебаний решетки. Это два полубесконечных полупроводника, разделенные гетеропереходом (рис. 2.3 а), трехслойная структура (двойная гетероструктура), образующая квантовую яму (рис. 2.3 б) и периодическая структура, образующая сверхрешетку (рис. 2.3 в).

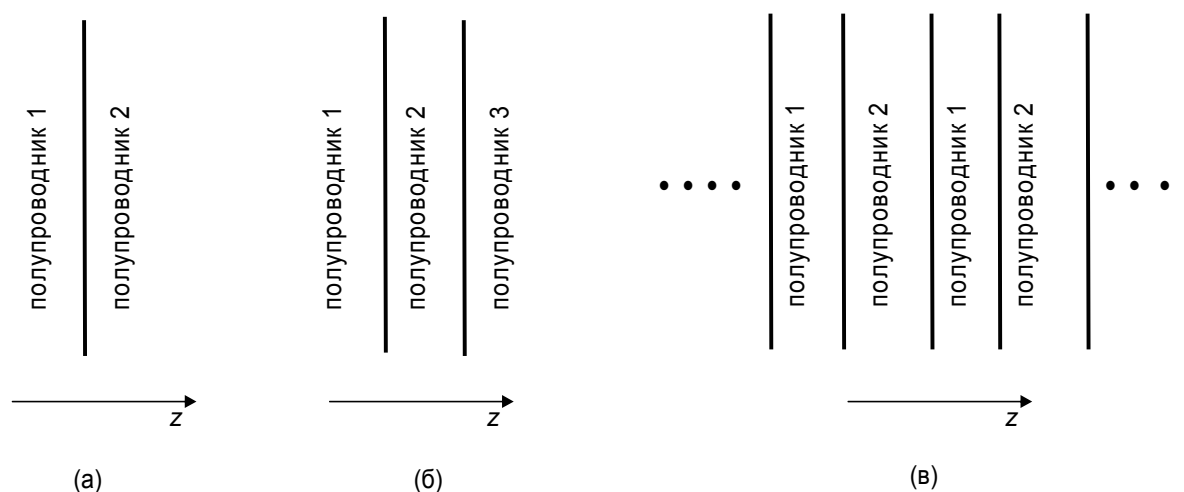


Рис. 2.3. Схемы трех возможных типов структур, отличающихся условиями распространения волн колебаний решетки

Рассмотрим по отдельности оптические и акустические фононы в гетероструктурах.

### 2.3.1. Акустические фононы (длинноволновое приближение)

Наиболее просто рассмотреть акустические колебания решетки в длинноволновом пределе  $q \rightarrow 0$ . В этом случае удобно использовать приближение теории упругости. Тогда зависимости частот продольных и поперечных акустических фононов от волнового вектора будут выглядеть следующим образом:

$$\begin{aligned}\omega_l(q) &= s_l q \\ \omega_t(q) &= s_t q,\end{aligned}\tag{2.2}$$

где  $s_l$  и  $s_t$  – скорости продольных и поперечных акустических волн.

Существенным является тот факт, что скорости акустических волн в полупроводниках, составляющих гетероструктуру, отличаются.

В любой системе из двух полупроводников возможно распространение акустических фононов в широком диапазоне частот, поэтому для одиночной гетероструктуры (рис. 2.3 а) практически все типы акустических волн могут существовать в обоих полупроводниках. Наличие гетероперехода приведет лишь к частичному отражению и преломлению акустических волн, что связано с различными скоростями этих волн по обе стороны от гетерограницы. При этом для определенных соотношений упругих постоянных существуют так называемые *интерфейсные* моды, т.е. колебания, локализованные вблизи гетерограницы и распространяющиеся вдоль нее. Амплитуды этих колебаний затухают при удалении от гетероперехода.

Рассмотрим более подробно поведение акустических мод в структуре с квантовой ямой (рис. 2.3 б).

Рассмотрим волну, распространяющуюся в плоскости квантовой ямы ( $x, y$ ). Для упрощения положим, что слои 1 и 3 образованы одним и тем же материалом, а также что упругие свойства среды позволяют распространяться только продольным волнам. Решение задачи теории упругости (см., например, [8]) приводит к результатам, аналогичным квантованию энергии поперечного движения электрона в квантовой яме. Оказывается, что если скорость акустических волн  $s$  в центральном слое структуры 2 меньше скорости в прилегающих слоях  $s_2 < s_1$ , то существует хотя бы одна волна, локализованная в области квантовой ямы. Частота колебаний и волновой вектор такой локализованной волны должны удовлетворять условию

$$\frac{\omega}{s_2} > q > \frac{\omega}{s_1}. \quad (2.3)$$

Роль потенциальной энергии, ограничивающей движение электрона в квантовой яме, в данной задаче играет величина  $-\hbar^2 \omega^2 / 2ms^2(z)$ . Масса  $m$  введена здесь только для приведения размерности выражения к размерности энергии. Локализация волны иллюстрируется качественно на рис. 2.4.

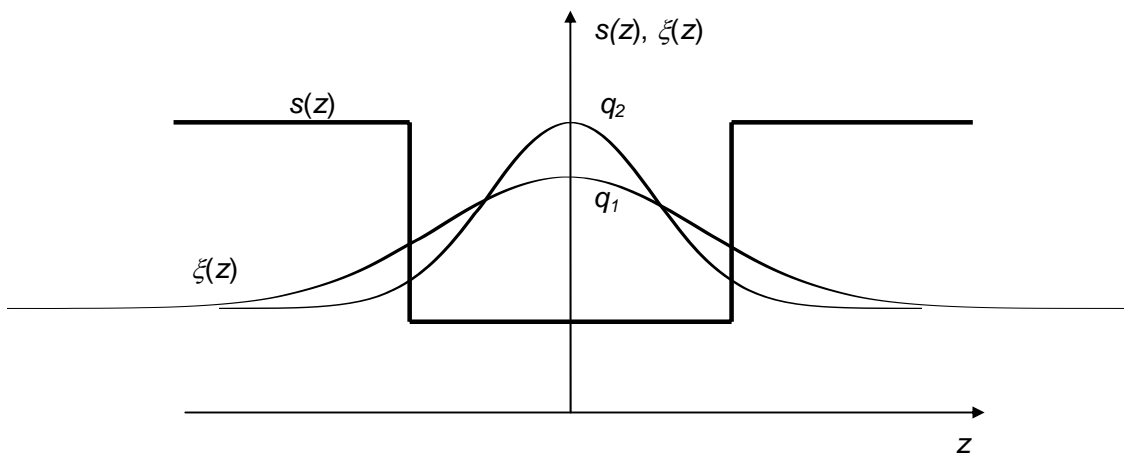


Рис. 2.4. Профиль скорости звука  $s(z)$  и амплитуды локализованной акустической волны  $\xi(z)$  для различных волновых векторов  $q_1 < q_2$  в структуре с квантовой ямой (схематично)

Локализация волны будет тем сильнее, чем глубже "потенциальная" яма для фононов, т.е. чем больший разрыв на границах претерпевает величина  $-\hbar^2 \omega^2 / 2ms^2(z)$ . Этот разрыв определяется следующим выражением:

$$V_0 = \omega^2 \left( \frac{1}{s_2^2} - \frac{1}{s_1^2} \right). \quad (2.4)$$

Отличием от размерного квантования электронов является зависимость глубины ямы от частоты волны  $\omega$ , а значит и от волнового вектора  $q$ . Это означает, что высокочастотные (коротковолновые) моды будут сильнее локализоваться в

центральной области структуры по сравнению с низкочастотными (длинноволновыми) модами, что иллюстрируется на рис 2.4. Условие сильной локализации волны может быть записано в следующем виде:

$$q \geq \frac{1}{L} \frac{s_1}{\sqrt{s_1^2 - s_2^2}}, \quad (2.5)$$

где  $L$  – ширина центрального слоя.

Более точный анализ, учитывающий распространение как продольных (LA), так и поперечных (TA) волн, не приводит к качественно новым результатам. В трехслойной структуре, в которой скорость звука в центральной ее части оказывается меньше, чем скорость звука в окружающих слоях, всегда существует хотя бы одна акустическая мода, локализованная в центральной области структуры. Степень локализации этой моды существенно зависит от ее волнового вектора и может оказаться невысокой по сравнению с локализацией электронной волновой функции в квантовой яме.

Обратимся теперь к акустическим волнам в сверхрешетках (рис. 2.5). Для упрощения рассмотрим распространение продольной волны в направлении оси роста структуры  $z$  (перпендикулярно ее плоскости).

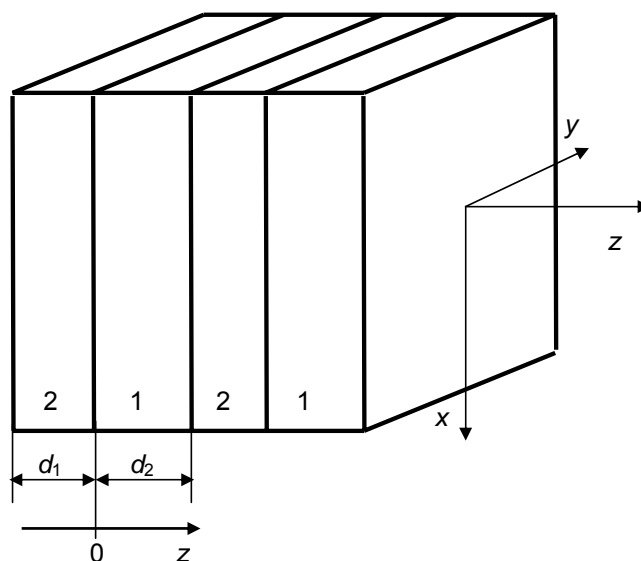


Рис. 2.5. Структура (сверхрешетка), образованная слоями материалов 1 и 2 с толщинами  $d_1$  и  $d_2$  (показано два периода структуры)

Задача является одномерной, в качестве неизвестной переменной удобно выбрать смещение атомов решетки из положения равновесия  $u_z(z)$ . В каждом слое волна смещения может быть представлена в виде суммы волн, бегущих в противоположных направлениях:

$$\begin{aligned} u_{z1} &= \left( A e^{iq_1 z} + B e^{-iq_1 z} \right) \cdot e^{-i\omega t}, \\ u_{z2} &= \left( C e^{iq_2 z} + D e^{-iq_2 z} \right) \cdot e^{-i\omega t}, \end{aligned} \quad (2.6)$$

где  $q_{1,2} = \omega/s_{1,2}$ , а  $s_{1,2}$  – скорости продольных звуковых волн в средах 1 и 2.

Для нахождения решения необходимо учесть граничные условия. На границах слоев должны быть непрерывны смещения и нормальные компоненты тензора напряжений  $\sigma_{zz} = \Lambda \partial u_z / \partial z$  ( $\Lambda = \rho s^2$  – модуль упругости,  $\rho$  – плотность материала):

$$u_{z1} = u_{z2}, \quad \Lambda_1 \frac{\partial u_{z1}}{\partial z} = \Lambda_2 \frac{\partial u_{z2}}{\partial z}. \quad (2.7)$$

Распространение волн в периодической среде подчиняется теореме Блоха:

$$u_z(z, t) = e^{iqz - i\omega t} u_z(z), \quad (2.8)$$

из которой следует:

$$u_z(z + d, t) = e^{iqd} u_z(z, t), \quad (2.9)$$

где  $u_z(z)$  – периодическая функция, т. е.  $u_z(z) = u_z(z + d)$ ,  $d = d_1 + d_2$  – период сверхрешетки. Физически различимые решения соответствуют определенным диапазонам волнового вектора  $q$ , которые называются *зонами Бриллюэна*. Так первая зона Бриллюэна определяется соотношением  $-\frac{\pi}{d} < q < \frac{\pi}{d}$ . Отметим, что зона Бриллюэна для сверхрешетки существенно меньше зоны Бриллюэна "обычной" кристаллической решетки, поскольку  $d \gg a$ , где  $a$  – период кристаллической решетки.

Дисперсионное соотношение, т.е. зависимость  $\omega(q)$ , может быть получена с использованием метода матриц переноса, описанного в 1 главе. Мы используем традиционный способ, основанный на "сшивке" зависимостей  $u_{z1}$  и  $u_{z2}$  на границах слоев.

Используя граничные условия (2.7) и условия периодичности (2.9) для функции  $u_z(z,t)$  и ее производной, получим:

$$\begin{aligned}
u_{z1}|_{z=0} &= u_{z2}|_{z=0} && \Rightarrow A + B = C + D \\
\Lambda_1 \frac{\partial u_{z1}}{\partial z} \Big|_{z=0} &= \Lambda_1 \frac{\partial u_{z2}}{\partial z} \Big|_{z=0} && \Rightarrow iq_1 \Lambda_1 A - iq_1 \Lambda_1 B = iq_2 \Lambda_2 C - iq_2 \Lambda_2 D \\
u_{z1}|_{z=d_1} &= e^{iqd} u_{z2}|_{z=-d_2} && \Rightarrow Ae^{iq_1 d_1} + Be^{-iq_1 d_1} = (Ce^{-iq_2 d_2} + De^{iq_2 d_2}) e^{iqd} \\
\Lambda_1 \frac{\partial u_{z1}}{\partial z} \Big|_{z=d_1} &= e^{iqd} \Lambda_1 \frac{\partial u_{z2}}{\partial z} \Big|_{z=-d_2} && \Rightarrow iq_1 \Lambda_1 e^{iq_1 d_1} A - iq_1 \Lambda_1 e^{-iq_1 d_1} B = \\
&&& = (iq_2 \Lambda_2 e^{-iq_2 d_2} C - iq_2 \Lambda_2 e^{iq_2 d_2} D) e^{iqd}
\end{aligned} \tag{2.10}$$

Дисперсионное соотношение может быть получено, если приравнять нулю определитель линейной однородной системы уравнений для коэффициентов  $A$ ,  $D$ ,  $C$  и  $B$  в правой части (2.10):

$$\cos qd = \cos \frac{\omega d_1}{s_1} \cos \frac{\omega d_2}{s_2} - \frac{1}{2} \left( \frac{\rho_2 s_2}{\rho_1 s_1} + \frac{\rho_1 s_1}{\rho_2 s_2} \right) \sin \frac{\omega d_1}{s_1} \sin \frac{\omega d_2}{s_2}. \tag{2.11}$$

Удобно ввести параметр, характеризующий различие упругих характеристик слоев, составляющих сверхрешетку:

$$\eta = \frac{\rho_2 s_2 - \rho_1 s_1}{\sqrt{\rho_1 \rho_2 s_1 s_2}}. \tag{2.12}$$

Тогда выражение (2.11) может быть переписано в более наглядной форме:

$$\cos qd = \cos \left[ \omega \left( \frac{d_1}{s_1} + \frac{d_2}{s_2} \right) \right] - \frac{\eta^2}{2} \sin \frac{\omega d_1}{s_1} \sin \frac{\omega d_2}{s_2}. \tag{2.13}$$



Для наиболее часто встречающихся сверхрешеток параметр  $\eta$  отличен от нуля, однако сравнительно мал, поэтому в выражении (2.13) можно пренебречь членом, пропорциональным  $\eta^2$ . В этом приближении:

$$\cos qd = \cos \left[ \omega \left( \frac{d_1}{s_1} + \frac{d_2}{s_2} \right) \right]. \quad (2.14)$$

Решением (2.14) является

$$q = \pm \frac{\omega}{d} \left( \frac{d_1}{s_1} + \frac{d_2}{s_2} \right) + \frac{2\pi n}{d}, \quad (2.15)$$

где  $n$  – целое число, определяющее номер зоны Бриллюэна. В дальнейшем будем рассматривать первую зону Бриллюэна, в которой  $n = 0$ .

Если ввести среду со средней скоростью звука  $S$  ( $d/S = d_1/s_1 + d_2/s_2$ ), то графически соотношение (2.15) может быть представлено дисперсионной характеристикой этой среды, "сложенной" таким образом, чтобы привести ее к первой зоне Бриллюэна сверхрешетки, как это показано на рис. 2.6 сплошной линией.

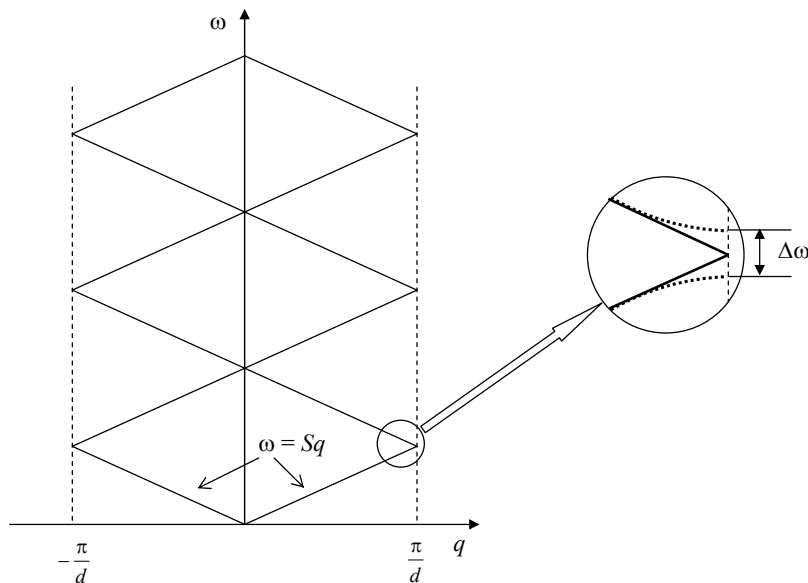


Рис. 2.6. Спектр "сложенных" акустических фононов в сверхрешетке.

На вставке демонстрируется образование запрещенных зон

Полученный спектр состоит из набора соприкасающихся разрешенных минизон. Запрещенные минизоны отсутствуют, что связано с вырождением, возникающим при таком рассмотрении в центре и на границах зоны Бриллюэна. Вырождение будет снято и появятся запрещенные минизоны, если учесть в формуле (2.13) малый член, пропорциональный  $\eta^2$ . Это приведет к расщеплению дисперсионных кривых в точках вырождения (см. вставку на рис. 2.6). Величина расщепления  $\Delta\omega$  зависит от номера ветви (минизоны). Для ширины первой запрещенной минизоны имеем:

$$\Delta\omega \approx 2\eta \frac{S}{d} \sin\left(\pi \frac{d_1 s_2 - d_2 s_1}{d_1 s_2 + d_2 s_1}\right). \quad (2.16)$$

Таким образом, в спектре акустических колебаний сверхрешетки появляются частоты, с которыми 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 конечным коэффициентом прохождения. Если же частота волны соответствует запрещенной минизоне, коэффициент прохождения акустической волны будет близок к нулю, падающая волна будет полностью отражаться от сверхрешетки.

### ***2.3.2. Коротковолновые акустические и оптические фононы***

Предыдущее рассмотрение колебаний решетки в структурах с пониженной размерностью использовало теорию упругости и было ограничено длинноволновым пределом  $q \rightarrow 0$ . Предположим, что длинноволновое приближение сохраняется для распространения волны вдоль гетероинтерфейсов ( $q_{\parallel} \rightarrow 0$ ), тогда для описания поперечной структуры коротковолновых акустических и оптических колебаний решетки можно ограничиться следующими качественными рассуждениями [8].

В данном разделе ограничимся рассмотрением двойной гетероструктуры (рис. 2.3 б), интерфейсы в которой перпендикулярны оси  $z$ , которая, в свою очередь, параллельна одной из кристаллографических осей, например  $[001]$ . Если материалы 1 и 2 имеют кубическую симметрию, то наличие интерфейсов не приводит к связи поперечных и продольных колебаний решетки, и их можно рассматривать по отдельности.

На рис. 2.7 условно изображены дисперсионные кривые для продольных колебаний решетки в обоих материалах.

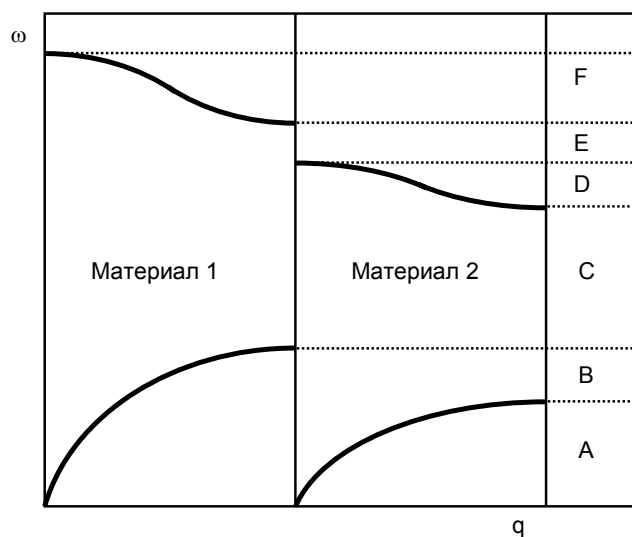


Рис. 2.7. Условная диаграмма дисперсии фононов в материалах 1 и 2

На оси частот можно выделить шесть областей, отмеченных на рис. 2.7 буквами А-Ф. Рассмотрим их, начиная с интервала А. В этом частотном диапазоне возможно распространение волн в обоих материалах, т.е. волна может свободно проходить через интерфейс. В интервалах В и F волна свободно распространяется только в среде 1, в среде 2 же она затухает. В случае одиночного гетероинтерфейса такие волны, падая со стороны среды 1, будут отражаться от него. Если слой материала 1 окружен слоями материала 2, то такие волны будут локализоваться в пределах слоя 1. Подобное поведение волны будет наблюдаться в интервале D: здесь будут наблюдаться волны, распространяющиеся или же локализованные в материале 2.

Последний случай – это частотные диапазоны С и Е, в которых волна не может распространяться в обоих материалах. В этом случае возможно существование интерфейсных мод. Схематическая иллюстрация возможных случаев для материала 2, помещенного между слоями материала 1, приводится на рис. 2.8.

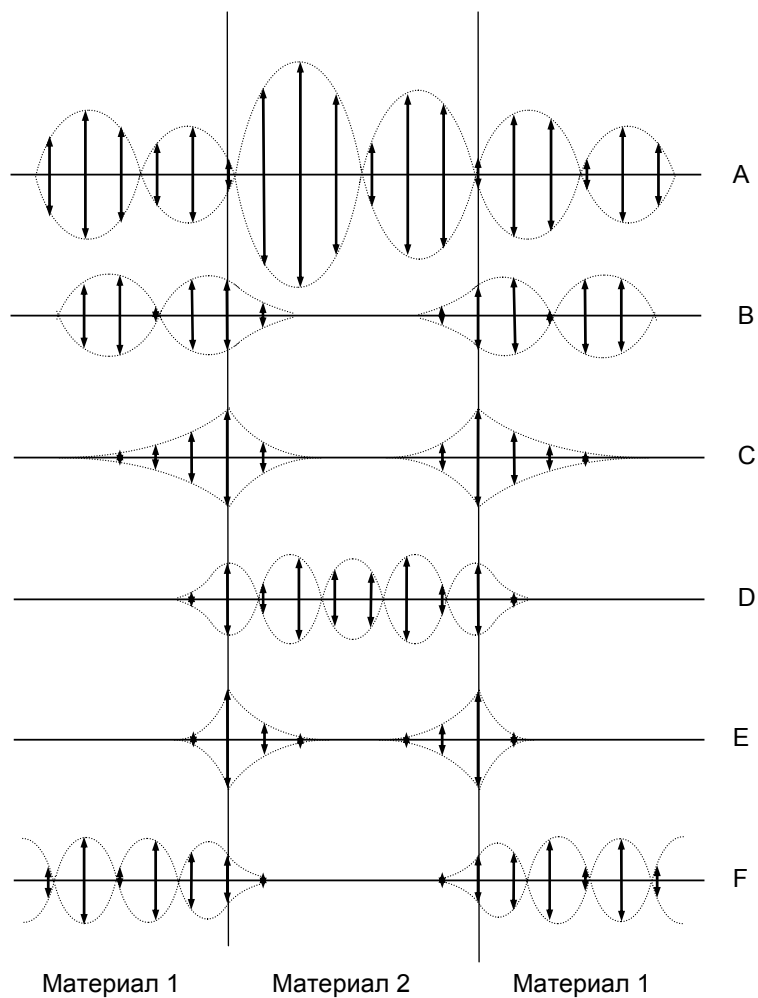


Рис. 2.8. Схема колебаний атомов решетки в двойной гетероструктуре для различных частотных интервалов А-Е, изображенных на рис. 2.7

Таким образом, в гетероструктурах возможно распространение трех типов волн колебаний решетки:

- распространяющиеся через всю структуру;
- локализованные в пределах слоя;
- интерфейсные.

В последнем случае амплитуда волны быстро (на протяжении нескольких периодов решетки) затухает при удалении от гетерограницы.

## 2.4. ЭЛЕКТРОН-ФОНОННОЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ В КВАНТОВЫХ ЯМАХ

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

Рассмотрим рассеяние электронов на фононах в бесконечно глубокой прямоугольной квантовой яме шириной  $L$  [9]. В этом случае волновые функции электрона в подзонах размерного квантования записываются следующим образом:

$$\psi(\mathbf{r}_{\parallel}, z) = \sqrt{\frac{2}{V}} u_{\mathbf{k}_{\parallel}} e^{i\mathbf{k}_{\parallel}\mathbf{r}_{\parallel}} \sin \frac{\pi z}{L} n, \quad (2.17)$$

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, определяющее номер подзоны,  $V$  – нормировочный объем.

Формально можно описывать электронные состояния в подзоне  $n$  величиной  $k_z = \pi n/L$  и считать ее  $z$ -компонентой волнового вектора, описывающей движение электрона вдоль оси  $z$ . Тогда энергия размерного квантования в подзоне  $n$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 \quad (2.18)$$

может быть выражена через  $k_z$  обычным образом:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}. \quad (2.19)$$

Отметим, что состояние двумерного электрона в подзоне размерного квантования, конечно же, не может быть описано  $z$ -компонентой "настоящего" волнового вектора, поскольку трансляционная симметрия в направлении  $z$  отсутствует и  $z$ -компонента волнового вектора не сохраняется, тем не менее, для удобства записи будем характеризовать электронное состояние величиной  $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$ . Введение величины  $k_z$  оправдано, поскольку можно ввести среднее значение квадрата  $z$ -компоненты волнового вектора для электрона в  $n$ -ой подзоне, равное именно  $k_z^2$ .

В приближении первого порядка теории возмущений скорость переходов из электронного состояния  $\mathbf{k}$  во все возможные состояния  $\mathbf{k}'$ , определяемая взаимодействием электронов с рассеивающими центрами (фононами), записывается следующим образом:

$$W_{\mathbf{k}} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}} \left| \langle \mathbf{k}' | \hat{H}_{ep} | \mathbf{k} \rangle \right|^2 \delta(E_{\mathbf{k}'} - E_{\mathbf{k}}), \quad (2.20)$$

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

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

$$\frac{1}{\tau_{\mathbf{k}}} = \frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\mathbf{k}} \frac{(\mathbf{k}_{\parallel} - \mathbf{k}'_{\parallel})}{k_{\parallel}} \left| \langle \mathbf{k}' | \hat{H}_{ep} | \mathbf{k} \rangle \right|^2 \delta(E_{\mathbf{k}'} - E_{\mathbf{k}}), \quad (2.21)$$

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

Фононы, участвующие в процессе рассеяния, характеризуются частотой  $\omega$  и волновым вектором  $\mathbf{q} = (q_x, q_y, q_z)$ . Как и для электрона, удобно выделить продольный волновой вектор  $q_{\parallel} = (q_x, q_y)$ . Для акустических фононов можно считать  $\omega_q = sq$  ( $s$  – скорость звука), а для оптических  $\omega_q = \omega_0 = \text{const}$ . Матричный элемент электрон-фононного взаимодействия может быть рассчитан подобно трехмерному случаю (см., например, [5]), необходимо только отдельно выделить интегрирование по координате  $z$ , поскольку зависимость волновой функции от  $z$  в двумерном и трехмерном случаях различна. Следующие выражения могут быть получены для рассеяния электронов на различных типах фононов (в (2.22) приведены выражения для случаев деформационных акустических, деформационных оптических и полярных оптических фононов, соответственно):

$$\left| \langle \mathbf{k}' | \hat{H}_{ep} | \mathbf{k} \rangle \right|^2 = \begin{cases} \frac{\Xi^2 k_B T}{2\rho s^2 V} |G(q_z)|^2 \delta_{\mathbf{q}_{\parallel}} \\ \frac{\hbar D_0^2}{2\rho \omega_0 V} |G(q_z)|^2 \delta_{\mathbf{q}_{\parallel}} \left( N(\omega_0) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \\ \frac{e^2 \hbar \omega_0}{2} \frac{q^2 (\varepsilon_{\infty}^{-1} - \varepsilon_0^{-1})}{(q^2 + q_0^2)^2} |G(q_z)|^2 \delta_{\mathbf{q}_{\parallel}} \left( N(\omega_0) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \end{cases} \quad (2.22)$$

Здесь  $\Xi$  – константа деформационного потенциала,  $D_0$  – константа оптического деформационного потенциала,  $\varepsilon_{\infty}$  и  $\varepsilon_0$  – высокочастотная и статическая диэлектрические проницаемости,  $G(q_z)$  – интеграл перекрытия (см. ниже),  $q_0$  – обратная длина экранирования,  $\delta_{\mathbf{q}_{\parallel}}$  отражает закон сохранения продольного квазиимпульса (он выполняется в силу наличия трансляционной симметрии в плоскости структуры):  $\mathbf{k}'_{\parallel} = \mathbf{k}_{\parallel} \pm \mathbf{q}_{\parallel}$ . Знаки "+" и "-" в (2.20) соответствуют переходам с испусканием и поглощением фонона, соответственно.

При переходе в выражениях (2.20) и (2.21) 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 (2.20), например, переписывается так:

$$W_{\mathbf{k}} = \frac{2\pi}{\hbar} \iiint \left| \langle \mathbf{k}' | \hat{H}_{ep} | \mathbf{k} \rangle \right|^2 \delta(E_{\mathbf{k}'} - E_{\mathbf{k}}) \frac{V}{(2\pi)^3} q_{\parallel} dq_{\parallel} dq_z d\theta, \quad (2.23)$$

где  $\theta$  – азимутальный угол в плоскости  $(x,y)$ .

Большую роль в описании процессов рассеяния в квантовых ямах, как следует из выражения (2.22), играет интеграл перекрытия, который в рассматриваемом случае квантовой ямы бесконечной глубины и соответствующих волновых функций (2.17) записывается следующим образом:

$$G(q_z) = \frac{2}{L} \int_0^L e^{iq_z z} \sin(k'_z z) \sin(k_z z) dz \quad (2.24)$$

Проанализируем это выражение. Интеграл вычисляется достаточно просто и может быть представлен в следующем виде:

$$G(q_z) = \frac{1}{2} \left( \frac{\sin \left[ \frac{q_z - (k'_z - k_z)L}{2} \right]}{\left[ \frac{q_z - (k'_z - k_z)L}{2} \right]} \exp \left\{ i \left[ \frac{q_z - (k'_z - k_z)L}{2} \right] \right\} + \frac{\sin \left[ \frac{q_z + (k'_z - k_z)L}{2} \right]}{\left[ \frac{q_z + (k'_z - k_z)L}{2} \right]} \exp \left\{ i \left[ \frac{q_z + (k'_z - k_z)L}{2} \right] \right\} - \frac{\sin \left[ \frac{q_z - (k'_z + k_z)L}{2} \right]}{\left[ \frac{q_z - (k'_z + k_z)L}{2} \right]} \exp \left\{ i \left[ \frac{q_z - (k'_z + k_z)L}{2} \right] \right\} - \frac{\sin \left[ \frac{q_z + (k'_z + k_z)L}{2} \right]}{\left[ \frac{q_z + (k'_z + k_z)L}{2} \right]} \exp \left\{ i \left[ \frac{q_z + (k'_z + k_z)L}{2} \right] \right\} \right) \quad (2.25)$$

Если рассматривать межподзонаное рассеяние электронов ( $k'_z \neq k_z$ ), то четыре слагаемых в (2.25) могут быть интерпретированы



как четыре возможных процесса рассеяния. Амплитуды этих процессов максимальны, если

$$q_z = \pm(k'_z \pm k_z), \quad (2.26)$$

одновременно остальные амплитуды обращаются в 0. Если вспомнить, что величина  $k_z$  является средним импульсом электрона в соответствующей подзоне, то получится, что выражение (2.26) отражает закон сохранения поперечного квазиимпульса (рассматриваемого как средняя величина). Процессы с  $q_z = \pm(k'_z - k_z)$  отражают переходы электронов между подзонами без отражения (направление  $k_z$  сохраняется), процессы с  $q_z = \pm(k'_z + k_z)$  соответствуют рассеянию электронов с отражением. Это иллюстрируется рис. 2.9.

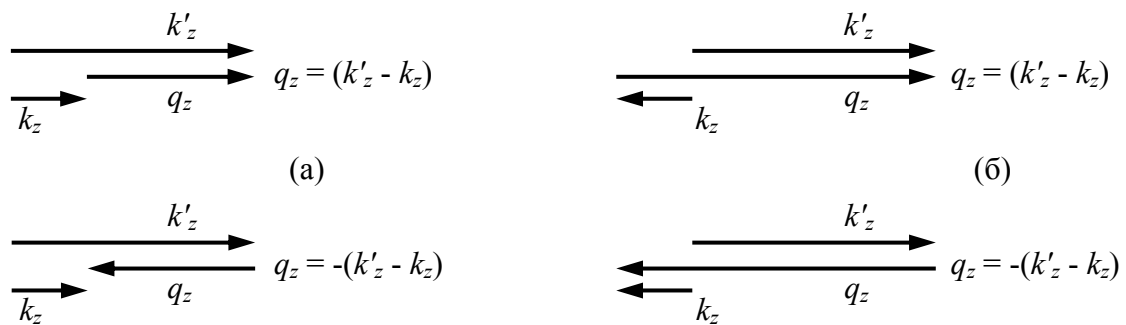


Рис. 2.9. Диаграммы, иллюстрирующие процессы межподзонного рассеяния электронов: (а) – без отражения; (б) – с отражением

Напомним еще раз, что в двумерном случае закон сохранения поперечного квазиимпульса строго не выполняется, поскольку трансляционная симметрия в направлении  $z$  отсутствует, и  $k_z$  не является хорошим квантовым числом. Это означает, что наряду с процессами, изображенными на рис. 2.9, возможны переходы и с другими значениями  $q_z$ . Однако, переходы, изображенные на рис. 2.9, все же имеют максимальные амплитуды. Кроме того, эти переходы не независимы. При возведении  $G(q_z)$  в квадрат, что необходимо для вычисления вероятности переходов, возникают перекрестные члены.

Как говорят, процессы, изображенные на рис. 2.9, *интерферируют*, и это необходимо учитывать при точном расчете вероятностей переходов.

Для внутризонного рассеяния ( $k'_z = k_z$ ) ситуация несколько иная. Первые два члена в (2.25) становятся идентичными, их амплитуды достигают максимума одновременно при  $q_z = 0$ . В отличие от случая межподзонного рассеяния, когда интерференция не дает существенного вклада в результат, в данном случае конструктивная интерференция между первыми двумя членами весьма существенна.

На данном этапе удобно использовать приближение, которое позволит легко продолжить аналитические вычисления. Это приближение уже обсуждалось нами и может быть названо *приближением сохранения поперечного квазиимпульса*. В данном приближении мы пренебрежем интерференционными членами (за исключением случая  $k'_z = k_z$ ) и получим для  $k'_z = k_z$ :

$$|G(q_z)|^2 \approx \frac{1}{4} \left[ 4 \left( \frac{\sin q_z L/2}{q_z L/2} \right)^2 + \left( \frac{\sin(q_z - 2k_z)L/2}{(q_z - 2k_z)L/2} \right)^2 + \left( \frac{\sin(q_z + 2k_z)L/2}{(q_z + 2k_z)L/2} \right)^2 \right] \quad (2.27)$$

и для  $k'_z \neq k_z$ :

$$|G(q_z)|^2 \approx \frac{1}{4} \left[ \left( \frac{\sin[q_z - (k'_z - k_z)]L/2}{[q_z - (k'_z - k_z)]L/2} \right)^2 + \left( \frac{\sin[q_z + (k'_z - k_z)]L/2}{[q_z + (k'_z - k_z)]L/2} \right)^2 + \right. \\ \left. + \left( \frac{\sin[q_z - (k'_z + k_z)]L/2}{[q_z - (k'_z + k_z)]L/2} \right)^2 + \left( \frac{\sin[q_z + (k'_z + k_z)]L/2}{[q_z + (k'_z + k_z)]L/2} \right)^2 \right] \quad (2.28)$$

Второй частью приближения сохранения поперечного импульса является упрощение интеграла перекрытия  $G(q_z)$ . Функциональная зависимость  $G(q_z)$  позволяет приближенно считать, что  $|G(q_z)|^2$  действует как дельта-функция:

$$\int_{q_z \min}^{q_z \max} f(q_z) |G(q_z)|^2 dq_z \approx \int_{-\infty}^{+\infty} f(q_z) |G(q_z)|^2 dq_z \approx \frac{2\pi}{L} f(q_{z0}) \frac{1}{4} \delta(q_{z0}), \quad (2.29)$$

где  $q_{z0}$  – одно из четырех значений, удовлетворяющих (2.26) (см. рис. 2.9).

Оценки показывают, что приближение сохранения поперечного импульса хорошо удовлетворяется для межподзонных переходов. Ситуация при внутривидовом рассеянии несколько хуже, здесь погрешность, вносимая данным приближением нарастает 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.

Рассмотрим теперь различные механизмы рассеяния электронов.

#### **2.4.1. Рассеяние на деформационном потенциале**

Рассеяние на деформационном потенциале характеризуется отсутствием зависимости матричного элемента рассеяния (2.20) 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 (2.20) и (2.21) выполняется особенно просто. Пусть  $n$  – номер подзоны начального состояния электрона. Тогда мы получаем для рассеяния на акустических фононах:

$$W_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\tau_{\mathbf{k}}} = \sum_{l=1}^{l_{\max}} \frac{(2 + \delta_{ln}) \pi \Xi^2 k_B T}{\hbar \Lambda} g(E_{\mathbf{k}}) \quad (2.30)$$

и для рассеяния на оптических фононах:

$$W_{\mathbf{k}} = \frac{1}{\tau_{\mathbf{k}}} = \sum_{l=1}^{l_{\max}} \frac{(2 + \delta_{ln}) \pi D_0^2}{2\rho\omega_0} [N(\omega_0)g(E_{\mathbf{k}} + \hbar\omega_0) + (N(\omega_0) + 1)g(E_{\mathbf{k}} - \hbar\omega_0)] \quad (2.31)$$

Здесь  $g(E_{\mathbf{k}}) = m/2\pi\hbar^2L$  – плотность состояний с определенным спином. Максимальный номер подзоны конечного состояния  $l_{\max}$  определяется из соотношений

$$\frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} l_{\max}^2 = E_{\mathbf{k}} = E_{k_{\parallel}} + E_n \quad (2.32)$$

для акустического рассеяния и

$$\frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} l_{\max}^2 = E_{\mathbf{k}} \pm \hbar\omega_0 \quad (2.33)$$

для оптического рассеяния.

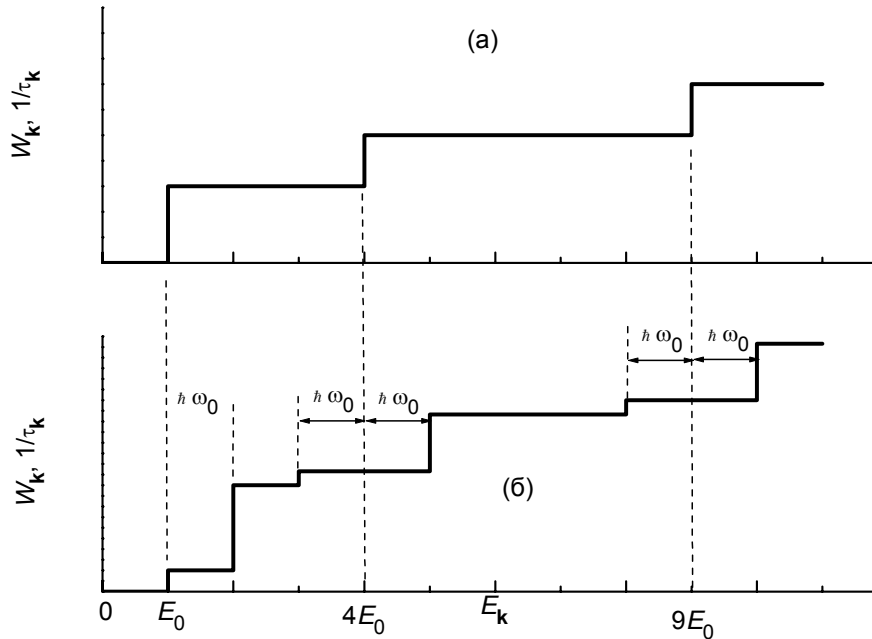


Рис. 2.10. Вероятности рассеяния на акустическом (а) и оптическом (б) деформационном потенциалах, рассчитанные для случая

$$E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = \hbar\omega_0, \quad N(\omega_0) = \frac{1}{4}$$

Соотношения (2.30) и (2.31) в предельном случае  $L \rightarrow \infty, l_{\max} \rightarrow \infty$  дают результат, соответствующий объемному полупроводнику.

В предельном случае рассеяния в пределах одной подзоны (что реализуется, например, для малой толщины квантовой ямы  $L$ ) получаем для акустических фононов:

$$W_{\mathbf{k}} = \frac{3\Xi^2 m k_B T}{2\hbar^3 \Lambda L} \quad (2.34)$$

и

$$W_{\mathbf{k}} = \frac{3D_0^2 m}{4\rho\hbar^2\omega_0 L} \left( N(\omega_0) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right) \quad (2.35)$$

для оптических фононов.

Полученные вероятности рассеяния имеют следующие отличительные особенности:

- отсутствие зависимости от энергии (в интервалах действия одного характера рассеяния);
- резкий порог начала рассеяния с эмиссией оптических фононов;
- обратно пропорциональная зависимость от толщины квантовой ямы.

На рис. 2.10 приведены зависимости, рассчитанные по формулам (2.30) и (2.31).

#### 2.4.2. Рассеяние 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  $W_{\mathbf{k}}$  и  $1/\tau_{\mathbf{k}}$  [9]. Мы не будем выписывать полные выражения для этих вероятностей и ограничимся только случаем внутривозонного рассеяния:

$$\begin{aligned} W_{\mathbf{k}} &= \frac{e^2(\varepsilon_{\infty}^{-1} - \varepsilon_0^{-1})}{4\hbar L} \left[ N(\omega_0) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right] \left( 2 + \frac{\hbar\omega_0}{[16E_0^2 + 8E_0(2E_{\mathbf{k}} \pm \hbar\omega_0) + (\hbar\omega_0)^2]^{1/2}} \right) \approx \\ &\approx \frac{e^2(\varepsilon_{\infty}^{-1} - \varepsilon_0^{-1})}{2\hbar L} \left[ N(\omega_0) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right]_{E_0 \gg \hbar\omega_0/4} \quad (2.36) \\ \frac{1}{\tau_{\mathbf{k}}} &= \frac{e^2\omega_0(\varepsilon_{\infty}^{-1} - \varepsilon_0^{-1})}{8LE_{\mathbf{k}}} \left[ N(\omega_0) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right] \left( 3 \mp 2 - \frac{4E_0 \pm \hbar\omega_0}{[16E_0^2 + 8E_0(2E_{\mathbf{k}} \pm \hbar\omega_0) + (\hbar\omega_0)^2]^{1/2}} \right) \approx \\ &\approx \frac{e^2\omega_0(\varepsilon_{\infty}^{-1} - \varepsilon_0^{-1})}{8LE_{\mathbf{k}}} \left[ N(\omega_0) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right] \left( 2 \mp 2 + \frac{E_{\mathbf{k}}}{2E_0} \right)_{E_0 \gg \hbar\omega_0/4} \end{aligned}$$

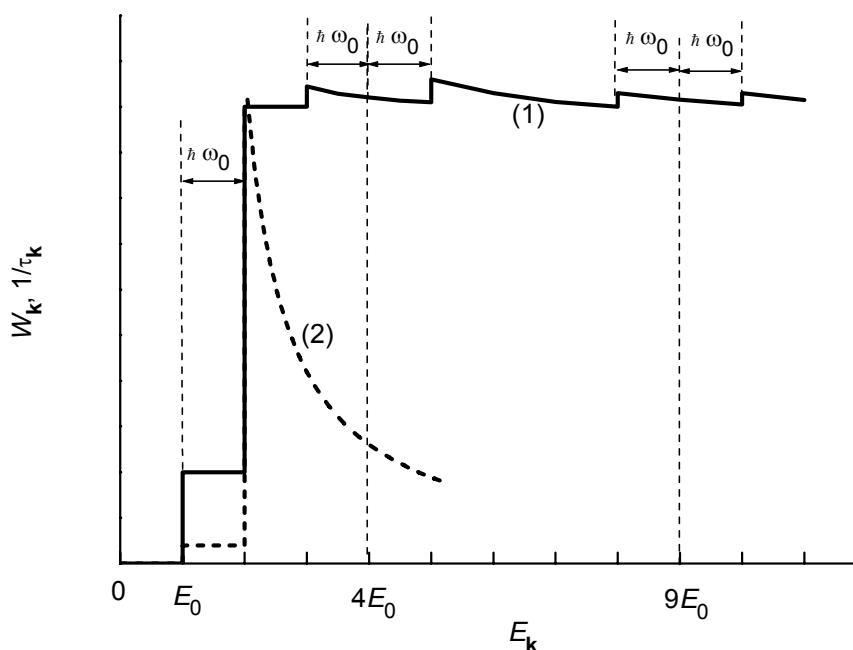


Рис. 2.11. Вероятность рассеяния (1) и скорость релаксации направленного импульса (2) при рассеянии на полярных оптических

фононах, рассчитанные для случая  $E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = \hbar\omega_0$ ,  $N(\omega_0) = \frac{1}{4}$

Анализируя полученные результаты, можно получить следующие особенности рассеяния на полярных оптических фононах:

- вероятность рассеяния  $W_k$  не зависит от энергии (за исключением скачков при включении рассеяния с эмиссией фононов);
- скорость релаксации направленного импульса, связанная с поглощением фононов, сравнительно мала и также не зависит от энергии:

$$\frac{1}{\tau_k} = \frac{e^2 \omega_0 m L (\epsilon_\infty^{-1} - \epsilon_0^{-1})}{8\pi^2 \hbar^2} N(\omega_0); \quad (2.37)$$

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

$$\frac{1}{\tau_{\mathbf{k}}} = \frac{e^2 \omega_0 (\epsilon_{\infty}^{-1} - \epsilon_0^{-1})}{2LE_{\mathbf{k}}} [N(\omega_0) + 1]. \quad (2.38)$$

Она совпадает со скоростью рассеяния при  $E_{\mathbf{k}} = \hbar\omega_0$  и затем уменьшается с ростом энергии. В отличие от случая поглощения фонона (2.37) эта вероятность увеличивается с уменьшением  $L$ .

На рис. 2.11 приведены вероятности рассеяния на полярных оптических фононах, рассчитанные при тех же условиях, что и кривые на рис. 2.10.

Приближение сохранения поперечного квазиимпульса, использованное в настоящей главе, является, конечно, приближенным, однако оно позволяет получить простые аналитические формулы, исследовать основные закономерности рассеяния электронов, выполнить предельный переход к случаю трехмерного движения. Более аккуратное описание процессов фононного рассеяния электронов в квантовых ямах приведено, например, в [10].

## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Ландау Л.Д.* Квантовая механика / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М.: Физматлит, 2001. – 803 с.
2. *Галицкий В.М.* Задачи по квантовой механике / В.М. Галицкий, Б.М. Карнаков, В.И. Коган. – М.: Наука, 1992. – 879 с.
3. *Флюгге З.* Задачи по квантовой механике: в 2 т. / З. Флюгге. – М.: Мир, 1974. – 656 с.
4. *Блейкмор Дж.* Физика твердого тела / Дж. Блейкмор. – М.: Мир, 1988. – 608 с.
5. *Ю П.* Основы физики полупроводников / П. Ю, М. Кардона. – М.: Физматлит, 2002. – 560 с.
6. *Waugh L.T.* Crystal dynamics of gallium arsenide / L.T. Waugh, G. Dolling // *Phys. Rev.* – 1963. – Vol. 132. – P. 2410-2412.
7. Low-dimensional semiconductor structures: fundamentals and device applications / Edited by K. Barnham and D. Vvedensky. – Cambridge University Press, 2001. – 393 p.
8. *Mitin V.V.* Quantum heterostructures: optoelectronics and microelectronics / V.V. Mitin, V.A. Kochelap, M.A. Strosio. – Cambridge University Press, 1999. – 642 p.
9. *Ridley B.K.* The electron-phonon interaction in quasi-two-dimensional semiconductor quantum-well structures / B.K. Ridley // *J. Phys. C: Solid State Phys.* – 1982. – Vol. 15. – P. 5899-5917.
10. *Ridley B.K.* Hot electrons in low-dimensional structures / B.K. Ridley // *Rep. Prog. Phys.* – 1991. – Vol. 54. – P. 169-256.



Гасумянц Виталий Эдуардович  
Фирсов Дмитрий Анатольевич

**ЭЛЕКТРОНЫ И ФОНОНЫ  
В КВАНТОВОРАЗМЕРНЫХ СИСТЕМАХ**

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 28.11.2008. Формат 60×84/16. Печать цифровая.  
Усл. печ. л. 6,0. Уч.-изд. л. 6,0. Тираж 100. Заказ 3811b.

---

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