

Поверхностные состояния в
сверхрешетке с шероховатой границей.

Былев А.А.

Научный руководитель: Кучма А.
Е.

Введение

Граница твердого тела с вакуумом или другой средой может служить источником ряда особых энергетических состояний электронов – поверхностных состояний, т.е. состояний, пространственно локализованных у границы тела. Возможность существования у поверхности кристалла связанных состояний электронов впервые рассмотрел И.Е. Тамм [1]. В нашей работе мы рассматривали поверхностные состояния в полубесконечных сверхрешетках.

Сверхрешетками принято называть твердотельные структуры, в которых, помимо периодического потенциала кристаллической решетки, имеется дополнительный периодический потенциал, период которого существенно превышает постоянную решетки. Параметры потенциала сверхрешеток можно варьировать в широких пределах, благодаря чему в сверхрешетках можно контролируемо изменять волновую функцию электронов, и зонную структуру спектра. Впервые такие системы были рассмотрены Л. В. Келдышем [2]. Сверхрешетки широко применяются в электронике и оптоэлектронике.

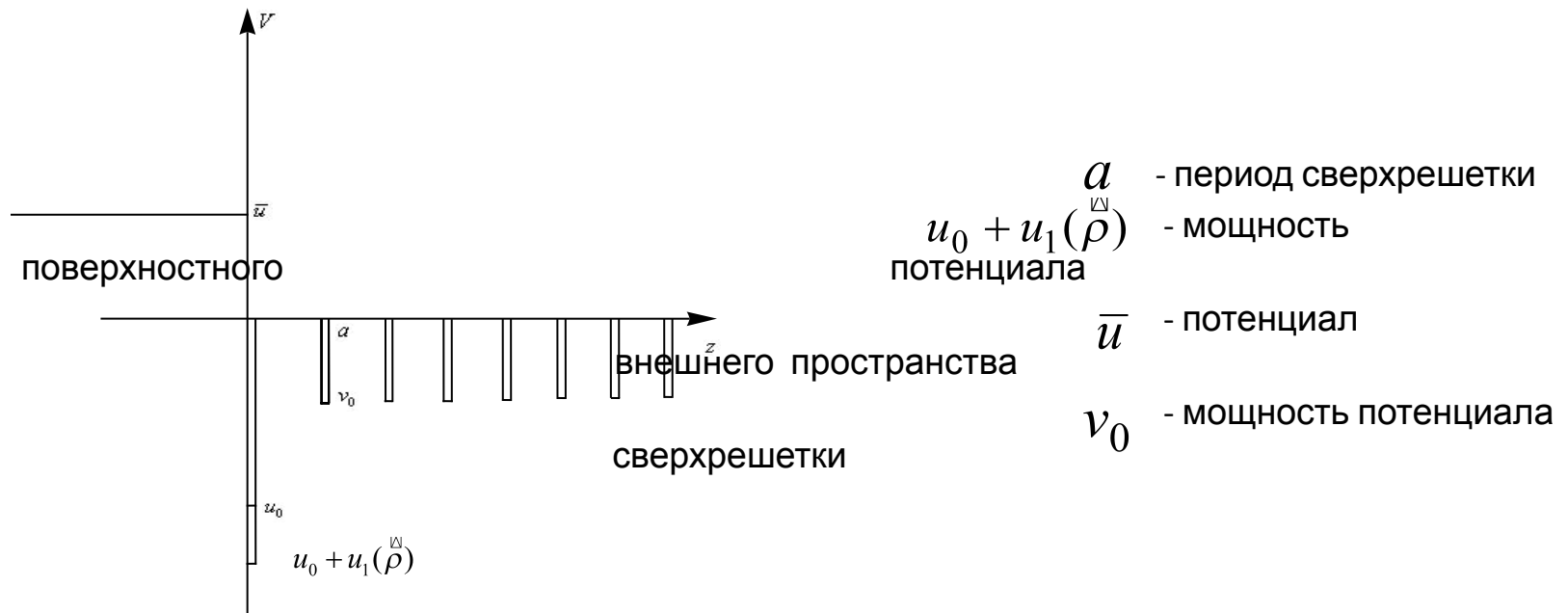
В общем случае поверхность не представляет собой резкого перехода от невозмущенного периодического потенциала к внешнему пространству. Следует также учитывать, что поверхность может быть покрыта неупорядоченным адсорбированным слоем. Такая шероховатость поверхности ведет к рассеянию поверхностной волны, представляющей поверхностные состояния электрона, на неровностях поверхности, в том числе поверхностная волна может преобразовываться в объемную волну. Представляет интерес оценить затухание поверхностного состояния, обусловленное таким рассеянием.

Постановка задачи

В простейшем однозонном приближении [3] для невырожденных энергетических зон кристаллической решетки уравнение Шредингера для огибающей функции имеет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \Psi(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}) = E \Psi(\mathbf{r})$$

С целью максимально упростить задачу будем считать, что потенциалы ям имеют вид функций. В рассматриваемой модели неровность поверхности можно описать, вводя зависимость мощности потенциала поверхностного слоя от координат точек слоя [4].



В результате приходим к уравнению Шредингера:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \left(-\Delta_{\rho} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \left[\bar{u} \theta(-z) - (u_0 + u_1(\rho)) \delta(z) - v_0 \sum_{n=1}^{\infty} \delta(z - na) \right] \right) \Psi(\rho, z) = E \Psi(\rho, z)$$

m - эффективная масса электрона

z - ось в направлении перпендикулярном плоскости сверхрешетки

$u_0 + u_1(\rho)$ - мощность потенциала поверхностного слоя

v_0 - мощность потенциала сверхрешетки

$u_{\perp}(\rho)$ - мощность потенциала шероховатости поверхности

u - потенциал внешнего пространства

Шероховатости поверхности будем считать случайными, т.е. $u_{\perp}(\rho)$ - есть случайная функция координат, среднее значение которой равно нулю. Будем также считать шероховатости статистически однородными с корреляционной функцией:

$$\langle u_{\perp}(\rho) u_{\perp}(\rho') \rangle = \langle \Delta U^2 \rangle W(\rho - \rho')$$

Решения уравнения для случая гладкой поверхности, т.е. $u_{\perp}(\rho) = 0$, неоднократно

обсуждались в литературе (см., например, [5]). В нашей модели при $u_{\perp}(\rho) = 0$ уравнение для гладкой и шероховатой поверхностей совпадают, что позволяет воспользоваться этими результатами.

В области $z \neq 0$ переменные Ψ и z в уравнении разделяются. Уравнение по z является уравнением для свободной частицы и его решения можно взять в виде плоских волн $e^{i(kz - \omega t)}$, где k - волновой вектор, параллельный плоскости решетки. Решения уравнения по z в этой же области

$$\left(-\frac{d^2}{dz^2} + \left[\bar{u}\theta(-z) - v_0 \sum_{n=1}^{\infty} \delta(z - na) \right] \right) \Psi(z) = q^2 \Psi(z)$$

могут быть в случае $q^2 < \bar{u}$ (убывающие со стороны $z < 0$ решения) выбраны в виде

$$\Psi(q, z) = \begin{cases} e^{\eta(q)z}, & z < 0 \\ \Phi_{\pm}(q, z), & z > 0 \end{cases}$$

где $\eta(q) = \sqrt{\bar{u} - q^2}$, а $\Phi_{\pm}(q, z)$ в зависимости от q либо блоховские волны вдоль оси z , либо убывающие вглубь решетки поверхностные состояния. Функции $\Phi_{\pm}(q, z)$ непрерывны в точке $z=0$ и $\Phi_{\pm}(q, 0) = 1$.

Общее решение $\Psi(\rho, z) = e^{ik\rho} \Psi(q, z)$ уравнения представляется линейной комбинацией блоховских и поверхностных волн, а энергетический спектр электрона

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} \varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m} (k^2 + q^2)$$

определяется из условий сшивания волновой функции по z на поверхности $z=0$

$$\begin{cases} \Psi(\rho, -0) = \Psi(\rho, +0) \\ -\Psi'(\rho, +0) + \Psi'(\rho, -0) - (u_0 + u_1(\rho))\Psi(\rho, 0) = 0 \end{cases}$$

В случае гладкой поверхности ($u_1(\rho) = 0$) условие может выполняться, в том числе, и для чисто поверхностных волн [5]. Эти состояния существуют только при определенных значениях $u_1(\rho)$. $e^{ik\rho} \Psi(q, z)$

В случае шероховатой поверхности потенциал шероховатости $u_1(\rho)$ смешивает состояния с разными k и q , что означает рассеяние поверхностного состояния.

Затухание поверхностного состояния

В соответствии с постановкой задачи представим волновую функцию электрона $\Psi(\rho, z)$ в

виде
$$\Psi(\rho, z) = e^{ik_0 \rho} \Psi(q_0, z) + \sum_{k \neq k_0} a(k) e^{ik\rho} \Psi(q, z)$$

где $e^{ik_0 \rho} \Psi(q_0, z)$ - поверхностная волна, а $\sum_{k \neq k_0} a(k) e^{ik\rho} \Psi(q, z)$ - либо поверхностные волны, либо уходящие вглубь решетки блоховские волны, при этом $q_0^2 + k_0^2 = q^2 + k^2 = \varepsilon$

и $\varepsilon < \bar{u}$

Энергию ε считаем вещественной. Как мы увидим, волновой вектор k_0 является комплексным, что отражает убывание амплитуды поверхностной волны в результате рассеяния. Такая ситуация не является реальной в случае неограниченной поверхности, но позволяет оценить затухание на единицу длины в области шероховатости.

Оценку затухания поверхностной волны проведем по теории возмущений, предложенной в [4]. Для этого условие на волновую функцию перепишем, явно выделив уравнение, содержащее $\Psi(q_0, z)$, (учтено, что $\Psi(q_0, z) = \Psi(q_0, -z)$)

$$\begin{cases} -\Psi'(q_0, +0) + \Psi'(q_0, -0) - u_0 - \sum_{k \neq k_0} u_1(k_0 - k) a(k) = 0 \\ (-\Psi'(q, +0) + \Psi'(q, -0) - u_0) a(k) - u_1(k - k_0) - \sum_{k' \neq k_0} u_1(k - k') a(k') = 0 \end{cases}$$

Здесь $u_1(k) = \frac{1}{(2l)^2} \int d\rho e^{-ik\rho} u_1(\rho)$ амплитуда Фурье потенциала шероховатости u_1 размер x и y решетки по осям x и y .

Считая возмущение поверхностной волны малым, отбросим во втором уравнении системы члены второго порядка малости и учитывая, что

$$\Psi'(q, -0) = \eta(q)$$

$$\lambda_{\pm} = L \pm \sqrt{L^2 - 1}$$

а
$$\Psi'(q, +0) = \frac{q}{\sin qa} (\lambda(q) - \cos qa)$$

$$L = \cos qa - \frac{v_0}{2q} \sin qa$$

$$\eta(q) = \sqrt{\bar{u} - q^2}$$

приходим к условию совместности системы
$$\frac{q_0}{\sin q_0 a} (\lambda(q_0) - \cos q_0 a) - \eta(q_0) + u_0 = \sum_k \frac{u_1(k_0 - k) u_1(k - k_0)}{\frac{q}{\sin qa} (\lambda(q) - \cos qa) - \eta(q) + u_0}$$

Это уравнение определяет волновые числа электронной поверхностной волны. Правая часть этого уравнения является комплексным числом в силу комплексности $\lambda(q)$ для блоховских волн и наличия нулей у знаменателя. В силу этого комплексными являются и волновые числа k_0 поверхностного состояния электрона. Мнимые добавки к волновому числу отражают затухание поверхностного состояния электрона вдоль шероховатой поверхности по сравнению со случаем гладкой поверхности. Кроме того, меняется и фазовая скорость k_0 поверхностной волны по сравнению со случаем гладкого интерфейса за счет добавки к вещественной части волнового числа.

Оценим затухание поверхностной электронной волны, усредненное по ансамблю реализаций поверхности со случайной шероховатостью. Поскольку нас интересует мнимая часть волнового числа k^2 , то суммирование можно вести только по области k^2 , соответствующей блоховским волнам, полюса же в этом уравнении учтем стандартным образом, обходя их по малой полуокружности в области комплексных

Для дальнейшего анализа выберем $\langle u_1(k_0 - k) u_1(k - k_0) \rangle$ в виде

$$\langle u_1(k_0 - k) u_1(k - k_0) \rangle = \frac{2\pi}{(2l)^2} \frac{\langle \Delta U^2 \rangle}{p_c^2} e^{-\frac{(k-k_0)^2}{2p_c^2}}$$

где $\sqrt{\langle \Delta U^2 \rangle}$ - среднеквадратичная случайная добавка к мощности поверхностного потенциала,

а p_c - обратная корреляционная длина шероховатости. Кроме того, заменой $\sum_k \rightarrow \frac{(2l)^2}{(2\pi)^2} \int dk$

выполним в уравнении стандартный переход от суммирования по квазидискретным волновым векторам к интегрированию.

$$F(q) \equiv \frac{q}{\sin qa} (\lambda(q) - \cos qa) - \eta(q) + u_0$$

Для краткости записи введем обозначение:

$$\Delta u_0(k_0, q_0)$$

После интегрирования по углам правая часть уравнения, которую обозначим $\Delta u_0(k_0, q_0)$, сводится к

$$\Delta u_0(k_0, q_0) = \frac{\langle \Delta U^2 \rangle}{p_c^2} \int_0^\infty \frac{dk^2}{2F(q)} e^{-\frac{k^2+k_0^2}{2p_c^2}} I_0\left(\frac{kk_0}{p_c^2}\right)$$

где $I_0\left(\frac{kk_0}{p_c^2}\right)$ - функция Бесселя от мнимого аргумента первого рода.

$$\Delta u_0(k_0, q_0)$$

Мнимая часть отрицательна и равна

$$\begin{aligned} \text{Im} \Delta u_0 = & -\frac{\langle \Delta U^2 \rangle}{p_c^2} \int_{-\infty}^{\varepsilon} \frac{dq^2}{2|F(q)|^2} \frac{q}{|\sin qa|} \sqrt{1-L^2(q)} e^{-\frac{\varepsilon-q^2+k_0^2}{2p_c^2}} I_0\left(\frac{\sqrt{\varepsilon-q^2} k_0}{p_c^2}\right) - \\ & - \pi \sum_i \frac{\langle \Delta U^2 \rangle}{p_c^2} \cdot \frac{q_i e^{-\frac{k_i^2+k_0^2}{2p_c^2}}}{F'(q_i)} I_0\left(\frac{k_i k_0}{p_c^2}\right) \end{aligned}$$

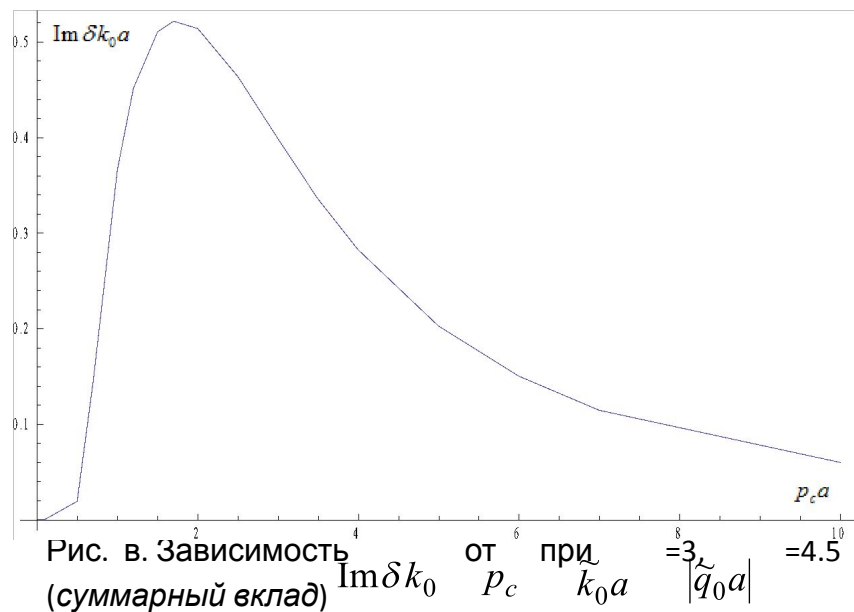
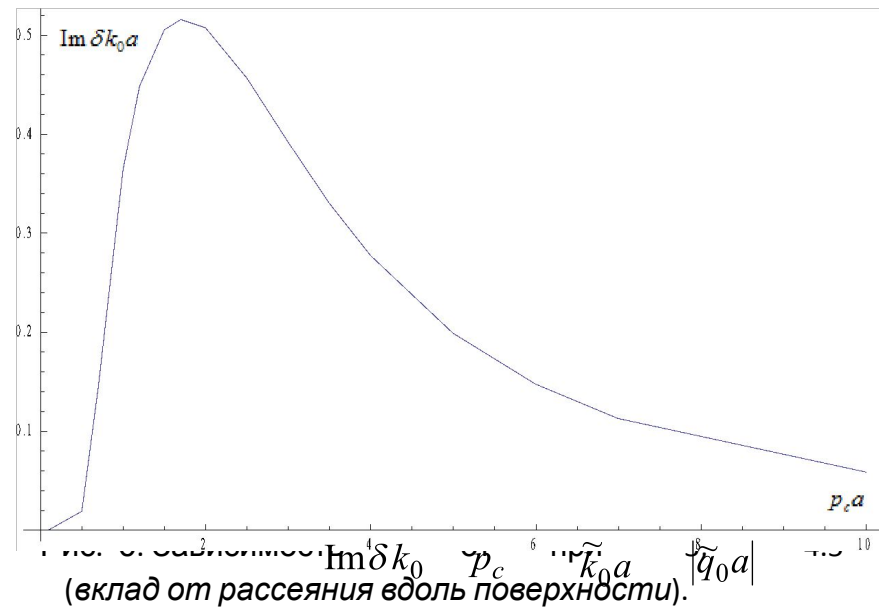
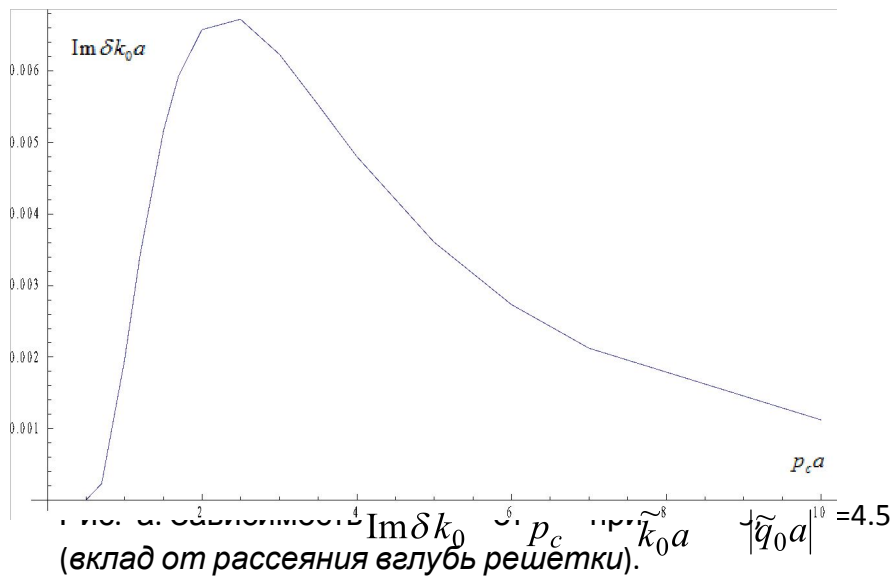
В интеграле выполнена замена переменных $q_i^2 = \varepsilon - q^2$ и интегрирование по q идет, как отмечалось, только по областям, отвечающим блоховским волнам, т.е. там, где $|L(q)| \leq 1$. Второе слагаемое есть вклад от полюсов $(q_i^2 + k_i^2 = \varepsilon)$. Считая затухание малым, в правую часть уравнения подставим значения \bar{q}_0, \bar{k}_0 , отвечающие поверхностному состоянию для гладкой поверхности с мощностью потенциала $\sqrt{\langle \Delta U^2 \rangle}$ поверхности. (Такой потенциал поверхности получается эффективно в пределе для уравнения с коррелятором и, кроме того, это позволяет избежать расходимости в полном члене в пределе $\gamma \rightarrow 0$). Тогда правая часть уравнения (11) даст просто поправку к \tilde{q}_0 . С учетом этого находим поправки к $(\tilde{q}_0, \tilde{k}_0)$

$F'(\tilde{q}_0) \delta q_0 = \Delta u_0(\bar{q}_0, \bar{k}_0)$
и поправки к волновому числу \tilde{k}_0 (учтено, что $q_0^2 + k_0^2 = \varepsilon$)

$$\delta k_0 = - \frac{\tilde{q}_0 \Delta u_0(\bar{q}_0, \bar{k}_0)}{\tilde{k}_0 F'(\tilde{q}_0)}$$

Расчеты

Для расчетов выберем случай $\gamma = 0$, $u_0 > v_0$. С учетом условия \bar{u} получаем, что $\epsilon < 0$. В области отрицательных ϵ имеется единственная «разрешенная» зона, отвечающая блоховским волнам, и для того, чтобы она давала вклад значение ϵ должно лежать выше этой зоны. Кроме того, в области отрицательных ϵ вклад от полюсов содержит только одно слагаемое, а условие \tilde{q}^2 ведет к тому, что ϵ лежит ниже разрешенной зоны. На рис. показана зависимость δk_0 от ϵ . Кроме того, отдельно показаны вклады в δk_0 только от рассеяния вглубь решетки и только за счет рассеяния по поверхности.



Как видно из результатов расчетов коэффициент затухания мал как $\text{Im} \delta k_0$ при $k_0 \gg k_0$, так и при $k_0 \ll k_0$, что физически оправдано. При большой корреляционной длине неровностей поверхности и малой длине поверхностной волны затухание мало, так как этот случай мало отличается от гладкой поверхности. В противоположном случае малой корреляционной длины неровностей и большой длины волны поверхностного состояния затухание также мало в силу сглаживания неровностей на расстояниях порядка длины волны, что опять ведет к случаю гладкой поверхности.

$$\text{Im} \delta k_0$$

Кроме того, при выбранных значениях параметров задачи вклад в $\text{Im} \delta k_0$ от рассеяния вглубь решетки сильно подавлен по сравнению с вкладом от рассеяния вдоль поверхности. Для выяснения причин этого проведем аналитические оценки первого и второго слагаемых. Интегрирование идет, как указывалось, по единственной «разрешенной» зоне в области отрицательных k_x . Границы зоны определяются условиями $k_x = \pm k_0$. Приближенное решение этого уравнения для границ зоны дает

$$|q|_{\pm} = \frac{v_0}{2} \left(1 \pm e^{-\frac{v_0 a}{2}} \right)$$

Откуда для ширины зоны находим

$$q_+^2 - q_-^2 = v_0^2 e^{-\frac{v_0 a}{2}}$$

Оценивая интеграл в (14) по теореме о среднем с учетом того, что в средней точке интервала $q_m \approx \frac{v_0}{2}$ можно считать $L(q_m) \approx L(q_0)$ находим

$$(\text{Im} \delta k_0)_1 = - \frac{\langle \Delta U^2 \rangle}{P_c^2} \frac{(v_0 a) e^{-v_0 a}}{\left(\frac{u_0}{v_0} - 1 \right)^2 + e^{-v_0 a}} e^{-\frac{k_m^2 + \bar{k}_0^2}{2P_c^2}} I_0 \left(\frac{k_m \bar{k}_0}{P_c^2} \right)$$

Оценка вклада второго слагаемого в (14) имеет вид

$$(\text{Im} \delta k_0)_2 = -\frac{\langle \Delta U^2 \rangle}{p_c^2} \pi u_0 a e^{-\frac{\tilde{k}^2 + \bar{k}_0^2}{2p_c^2}} I_0\left(\frac{\tilde{k} \bar{k}_0}{p_c^2}\right)$$

где учтено, что $\tilde{q} \approx \frac{u_0}{2}$.

Как видим $(\text{Im} \delta k_0)_1$ и $(\text{Im} \delta k_0)_2$ имеют подобное поведение, как функции v_0 , но существенно разное поведение в зависимости от параметров потенциала сверхрешетки v_0 и потенциала поверхностного слоя u_0 . При выбранных при численных расчетах значениях параметров $v_0 = 1,5$ и $u_0 a = 8$ отношение вкладов от рассеяния вглубь решетки и от рассеяния вдоль поверхности при $p_c a \sim 1$ составляет

$$(\text{Im} \delta k_0)_1 / (\text{Im} \delta k_0)_2 \sim \frac{v_0}{u_0} e^{-v_0 a} e^{\frac{\tilde{q}^2 - q_m^2}{2p_c^2}} \sim 10^{-3}$$

Заключение

Проведен анализ влияния шероховатости границы сверхрешетки на поверхностные состояния электронов в простейшем однозонном приближении для невырожденных энергетических зон кристаллической решетки. Сверхрешетка моделировалась -образными потенциальными ямами, поверхностная потенциальная яма отличалась по глубине от остальных потенциальных ям сверхрешетки, а неровность поверхности вводилась через зависимость мощности потенциала поверхностного слоя от координат точек слоя.

Показано, что волновая функция усредненного поверхностного состояния будет затухать в направлении распространения вдоль граничной поверхности сверхрешетки в результате рассеяния на неровностях поверхности и преобразования поверхностной волны в объемные блоховские волны, уходящие вглубь решетки. Получены выражения для коэффициента затухания поверхностного состояния в продольном направлении, при этом выделены вклады, обусловленные рассеянием вдоль поверхности и рассеянием с преобразованием поверхностной волны в объемные волны, и проведены расчеты этого коэффициента.

Примечания

Функции $\Phi_{\pm}(z)$ имеют вид

$$\Phi_{\pm}(z) = \frac{1}{1 + \beta_{\pm}} \lambda_{\pm}^{\left[\frac{z}{a}\right]} \left(e^{-iqa\left\{\frac{z}{a}\right\}} + \beta_{\pm} e^{iqa\left\{\frac{z}{a}\right\}} \right)$$

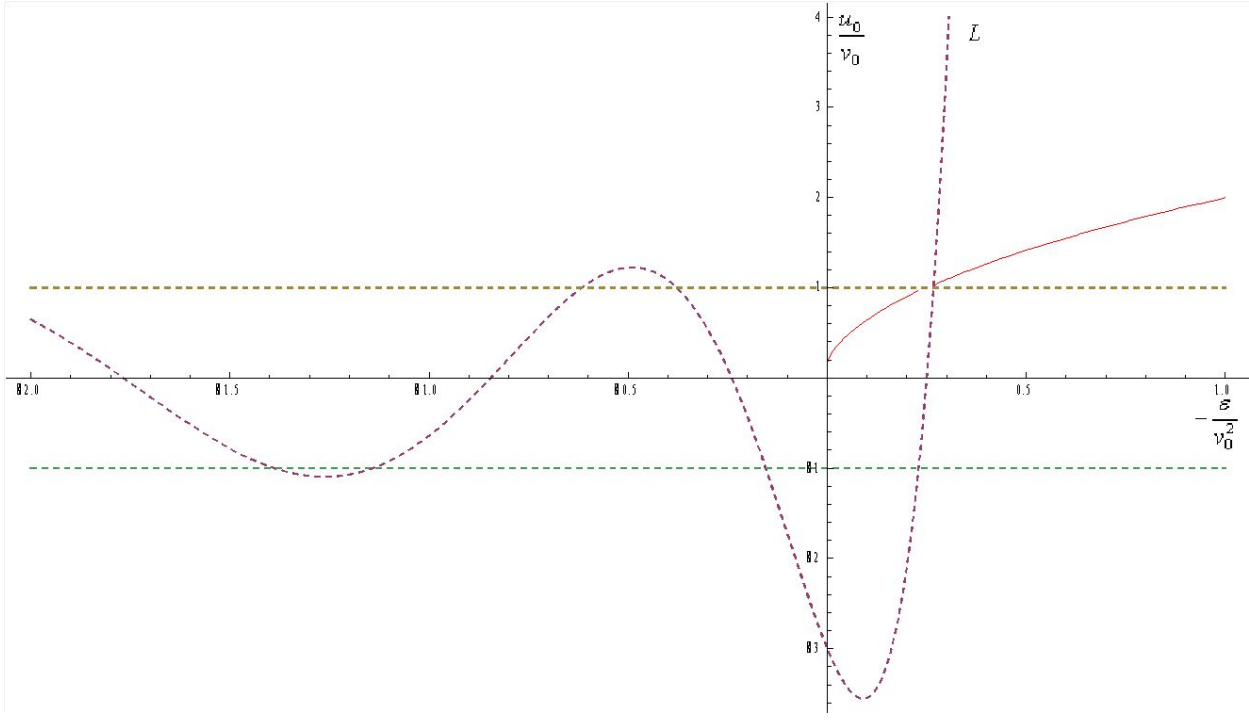
Здесь $\left[\frac{z}{a}\right]$ - целая часть числа $\frac{z}{a}$ $\left\{\frac{z}{a}\right\}$ - его дробная часть и

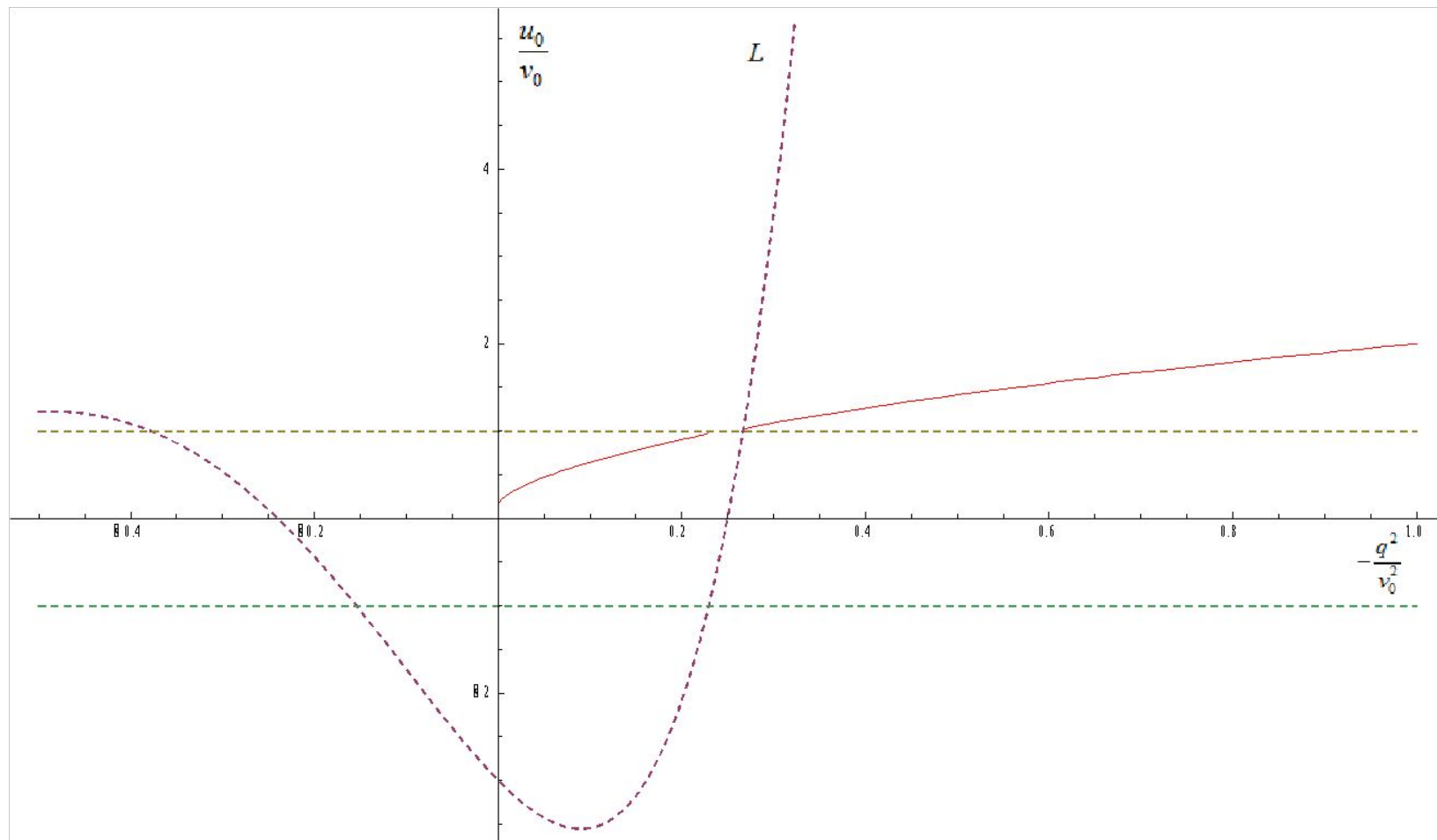
$$\beta_{\pm} = \frac{e^{-iqa} - \lambda_{\pm}}{\lambda_{\pm} - e^{iqa}}$$

где

$$\lambda_{\pm} = L \pm \sqrt{L^2 - 1}$$

$$L = \cos qa - \frac{v_0}{2q} \sin qa$$





Список литературы

1. И.Е. Тамм. ЖЭТФ, 1933, т.3, с. 34
2. Л.В. Келдыш. ФТТ, 1962, т.4, с. 2265
3. П. Ю, М. Кордона. Основы физики полупроводников. М.: Физматлит, 2002
4. А.Е. Кучма, Д.В. Ковалевский, Н.В. Воронин. Вестн. С.-Петербур. ун-та, Сер. 4, 2008, Вып.4, С. 3 – 15
5. И.М. Лифшиц, С.И. Пекар. УФН, 1955, т.56, вып.4, с. 531
6. Г.Б. Двайт. Таблицы интегралов. М.: «Наука», Главная редакция физико-математической литературы, 1978.