1994 PHYSICS AND TECHNICS OF SEMICONDUCTORS vol. 28, N 1

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПОВЕРХНОСТНЫХ СОСТОЯНИЙ С УРОВНЯМИ РАЗМЕРНОГО КВАНТОВАНИЯ В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

М. М. Врубель

Белорусский государственный университет, 220050, Минск, Беларусь
(Получена 26 октября 1992 г. Принята к печати 7 июня 1993 г.)

В работе исследуется влияние электрического поля на энергию E_R и резонансную ширину Γ уровней квантовой ямы с поверхностными состояниями на краях. Расчеты приводятся в модели, учитывающей различие блоховских функций краев зон граничащих слоев. Зависимости E_R и Γ от напряженности электрического поля S получены в результате точного численного решения уравнения Шредингера с комплексной энергией $E = E_R - i\Gamma/2$.

Экспериментальное обнаружение таммовских состояний оказалось возможным вследствии того, что существуют значительные различия между зависимостями энергий локализованного и нелокализованного состояний от напряженности электрического поля [1, 2]. Представляет интерес дальнейшее изучение такого рода различий. В настоящей работе исследуется поведение в электрическом поле состояний, возникающих в квантовой яме, граничные условия для которой учитывают различие блоховских функций краев зон контактирующих веществ.

1. Условия сшивания для огибающих функций

Будем решать задачу для случая одной зоны в приближении эффективной массы. Волновую функцию запишем в приближении огибающих функций в виде произведения быстро меняющейся блоховской функции края зоны $\delta(z)$ на огибающую $\Phi(z)$

$$\Psi(z) = \Phi(z)\,\delta(z). \tag{1}$$

Для того чтобы записать граничные условия для огибающих функций, позволяющие получить локализованные на границе состояния, естественно использовать условие непрерывности волновой функции $\Psi(z)$ и ее первой производной на границе двух слоев полупроводников A и B. Будем считать, что эффективная масса электрона одинакова во всех граничащих слоях ($m_A = m_B = m^*$)

$$\begin{gathered}\Phi_A(z)\,\delta_A(z) = \Phi_B(z)\,\delta_B(z),\\ \Phi_A'(z)\,\delta_A(z) + \Phi_A(z)\,\delta_A'(z) = \Phi_B'(z)\,\delta_B(z) + \Phi_B(z)\,\delta_B'(z).\end{gathered} \tag{2}$$

Отсюда

$$\frac{\Phi_A'(z)}{\Phi_A(z)} - \frac{\Phi_B'(z)}{\Phi_B(z)} = \frac{\delta_B'(z)}{\delta_B(z)} - \frac{\delta_A'(z)}{\delta_A(z)}. \tag{3}$$

В формулах (2), (3) и далее штрихами обозначены производные по z. Введем обозначение

$$G = \frac{\delta_B'(z)}{\delta_B(z)} - \frac{\delta_A'(z)}{\delta_A(z)}. \tag{4}$$

Будем считать, что на поверхности изолированного контакта двух слоев А и В возникает локализованное состояние, и его энергия, отсчитываемая от более глубокого края зоны проводимости в глубь запрещенной зоны, составляет E_s. Высоту потенциального барьера обозначим через V. Тогда в нулевом электрическом поле для $E = E_s$, если слой А расположен слева, а слой В справа,

$$\Phi_A(z) = a \exp(k_A z), \quad \Phi_B(z) = b \exp(-k_B z), \tag{5}$$

и можно записать G как

$$G_{AB} = k_A + k_B, \tag{6}$$

где $k_B = (2m^* E_s/\hbar^2)^{1/2}$, $k_A = (2m^*(E_s + V)/\hbar^2)^{1/2}$.

Если же слой А расположен справа, а слой В слева, получаем

$$\Phi_A(z) = a \exp(-k_A z), \quad \Phi_B(z) = b \exp(k_B z), \tag{7}$$

$$G_{BA} = -k_A - k_B. \tag{8}$$

Выражения (6) и (8) связывают величину G, характеризующую различие блоховских функций краев зон контактирующих веществ, с величинами E_s и V.

Граничные условия (3) были получены в [3, 4] с помощью другого подхода и исследовались в [5] для кейновского приближения. Рассмотренный здесь подход обсуждался в [6] с той лишь разницей, что мы для бóльшей наглядности выразили G через E_s и V.

2. Точное решение уравнения Шредингера в электрическом поле для граничных условий, учитывающих различие блоховских функций краев зон контактирующих веществ.

Уравнение Шредингера для электрона в нашем случае имеет вид [3, 4]

$$-\frac{\hbar^2 d^2\Phi(z)}{2m^* dz^2} - E - |e|\, Sz - V^* + \frac{\hbar^2}{2m^*} G_{AB}\delta\left(|z| - \frac{L}{2}\right)\Phi(z) = 0, \tag{9}$$

где m^* — эффективная масса, e — заряд электрона, S — напряженность электрического поля, в нашем случае $V^* = 0$ в слое В и $V^* = V$ в слое А (рис. 1), $\delta(z)$ — δ-функция Дирака.

Поскольку потенциальная энергия стремиться к $-\infty$, когда z стремится к $-\infty$, в системе не существует действительно связанного состояния, и взамен решения уравнения Шредингера, конечного при z, стремящемся к $-\infty$, будем рассматривать уходящую волну [7, 8], что соответствует частице, покидающей яму путем туннелирования. В результате решения уравнения Шредингера мы получим набор комплексных величин, которые могут быть записаны в виде

$$E = E_R - i\Gamma/2, \tag{10}$$

где Г всегда положительно.

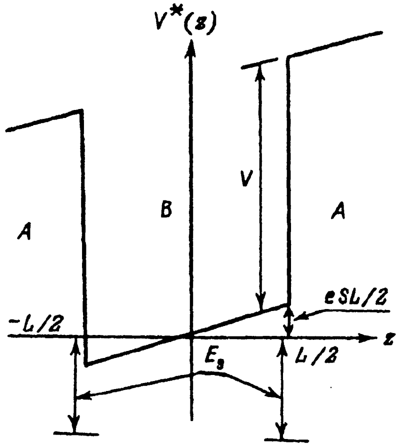

Рис. 1. Профиль потенциальной энергии $V^*(z)$ для квантовой ямы ширины L и глубины V во внешнем электрическом поле напряженности S. E_S — энергия поверхностного состояния, возникающего на изолированном контакте слоев A и B при $S = 0$.

E_R представляет собой энергию квазистационарного уровня, Γ — резонансную ширину этого уровня. Время жизни в квазистационарном состоянии определяется как [2]

$$\tau = \hbar/\Gamma. \tag{11}$$

Решение уравнения (8) представляет собой линейную комбинацию двух независимых функций Эйри [9]

$$\Phi(z) = \begin{cases} a_1(\mathrm{Bi}(Z) + i\mathrm{Ai}(Z)), & z < -L/2 \\ a\mathrm{Ai}(Z) + b\mathrm{Bi}(Z), & -L/2 < z < L/2, \\ a_2\mathrm{Ai}(Z), & z > L/2 \end{cases} \tag{12}$$

где

$$Z = -\left[\frac{2m^*}{(e\hbar S)^2}\right]^{1/3}(E - V^* - |e|\,Sz). \tag{13}$$

Используя условия сшивания (3), получаем систему двух уравнений, линейных относительно неизвестных a и b,

$$a\left(\mathrm{Ai}'_{\mathrm{BR}} - \left(\frac{\mathrm{Ai}'_{\mathrm{AR}}}{\mathrm{Ai}_{\mathrm{AR}}} + K_R\right)\mathrm{Ai}_{\mathrm{BR}}\right] + b\left[\mathrm{Bi}'_{\mathrm{BR}} - \left(\frac{\mathrm{Ai}'_{\mathrm{AR}}}{\mathrm{Ai}_{\mathrm{AR}}} + K_R\right)\mathrm{Bi}_{\mathrm{BR}}\right] = 0,$$

$$a\left[\mathrm{Ai}'_{\mathrm{BL}} - \left(\frac{\mathrm{Bi}_{\mathrm{AL}] + i\mathrm{Ai}'_{\mathrm{AL}}}}{\mathrm{Bi}_{\mathrm{AL}} + i\mathrm{Ai}_{\mathrm{AL}}} - K_L\right)\mathrm{Ai}_{\mathrm{BL}}\right] + b\left[\mathrm{Bi}'_{\mathrm{BL}} - \left(\frac{\mathrm{Bi}'_{\mathrm{AL}} + i\mathrm{Ai}'_{\mathrm{AL}}}{\mathrm{Bi}_{\mathrm{AL}} + i\mathrm{Ai}_{\mathrm{AL}}} - K_L\right)\mathrm{Bi}_{\mathrm{BL}}\right] = 0, \tag{14}$$

где $K_{R,L} = (2m^*/\hbar^2)^{1/2}\,(E_s + V + x_{R,L}\,|e|\,SL/2)^{1/2} + (E_s + x_{R,L}\,|e|\,SL/2)^{1/2})\,]/Z'$, $(x_R = 1,\quad x_L = -1)$, $\mathrm{Ai}_{AR} = \mathrm{Ai}\ (z = L/2,\quad V^* = V)$, $\mathrm{Ai}_{AL} = \mathrm{Ai}\ (z = -L/2, V^* = V)$, $\mathrm{Ai}_{BR} = \mathrm{Ai}\ (z = L/2,\ V^* = 0)$, $\mathrm{Ai}_{BL} = \mathrm{Ai}\ (z = -L/2,\ V^* = 0)$, для функций Bi нижние индексы имеют такой же смысл, как и для Ai.

Для того чтобы система (14) имела нетривиальное решение, необходимо, чтобы ее определитель был равен нулю

$$\left[\mathrm{Ai}'_{\mathrm{BR}} - \left(\frac{\mathrm{Ai}'_{\mathrm{AR}}}{\mathrm{Ai}_{\mathrm{AR}}} + K_R\right)\mathrm{Ai}_{\mathrm{BR}}\right]\cdot\left[\mathrm{Bi}'_{\mathrm{BL}} - \left(\frac{\mathrm{Bi}'_{\mathrm{AL}} + i\mathrm{Ai}'_{\mathrm{AL}}}{\mathrm{Bi}_{\mathrm{AL}} + i\mathrm{Ai}_{\mathrm{AL}}} - K_L\right)\mathrm{Bi}_{\mathrm{BL}}\right] -$$

$$-\left[\mathrm{Bi}'_{\mathrm{BR}} - \left(\frac{\mathrm{Ai}'_{\mathrm{AR}}}{\mathrm{Ai}_{\mathrm{AR}}} + K_R\right)\mathrm{Bi}_{\mathrm{BR}}\right]\cdot\left[\mathrm{Ai}'_{\mathrm{BL}} - \left(\frac{\mathrm{Bi}'_{\mathrm{AL}} + i\mathrm{Ai}'_{\mathrm{AL}}}{\mathrm{Bi}_{\mathrm{AL}} + i\mathrm{Ai}_{\mathrm{AL}}} - K_L\right)\mathrm{Ai}_{\mathrm{BL}}\right] = 0. \tag{15}$$

Введем нормированные величины, которые избавят нас от необходимости рассматривать конкретные значения m^*, L, E_s и V. Для этого введем величину E_0, определенную как

$$E_0 = \frac{\hbar^2}{2m}\left[\frac{\pi}{L}\right]^2. \tag{16}$$

Это, как известно, энергия первого уровня размерного квантования бесконечно глубокой ямы шириной L. Определим следующие нормированные величины:

$$\tilde{V} = \frac{V}{E_0}, \quad \tilde{E}_s = \frac{E_s}{E_0}\, \tilde{E} = \frac{E}{E_0}, \quad \tilde{S} = \frac{eSL}{E_0}, \tag{17}$$

тогда значения Z на границах ямы могут быть выражены через нормированные величины следующим образом:

$$Z = -\left(\frac{\pi}{\tilde{S}}\right)^{2/3} (\tilde{E} + \tilde{V}^* \pm 0.5\tilde{S})\Big|_{z = \mp L/2}. \tag{18}$$

Величины K_R и K_L выражаются как

$$K_{R,L} = \left(\frac{\Pi}{\tilde{S}}\right)^{1/3} \left[\left(\tilde{E}_s + \tilde{V} + x_{R,L}\frac{\tilde{S}}{2}\right)^{1/2} + \left(\tilde{E}_s + x_{R,L}\frac{\tilde{S}}{2}\right)^{1/2}\right]. \tag{19}$$

Некоторые результаты численного решения (14) приведены на рис. 2—5. Функции Эйри для комплексной переменной Z вычислялись с достаточной степенью точности с помощью рядов и ассимптотических приближений [9].

3. Особенности влияния электрического поля на значения энергии и резонансной ширины уровней квантовых ям с граничными условиями, учитывающими существование поверхностных состояний

Обратимся к зависимостям, приведенным на рис. 2, 4. Для достаточно больших значений $\tilde{E}_s$ на зависимости $\tilde{E}_R(\tilde{S})$ можно последить выполнение обычного (при взаимодействии локализованного состояния с другими в электрическом поле) правила непересечения уровней, когда второй уровень выталкивает третий с ростом S, как бы занимая его место. При дальнейшем увеличении S то же происходит с третьим и четвертым уровнями (если яма достаточно глубока) и так далее [1, 2, 10]. Такая картина объясняется следующим образом. Энергия дна ямы в точках $\mp L/2$ меняется в поле напряженности S на $|eSL/2|$ относительно выбранного нами начала отсчета — центра ямы, что приводит к изменению энергии локализованных в окрестности этих точек состояний. Но изменение энергии поверхностного состояния относительно центра ямы всегда меньше $|eSL/2|$, так как существует эффект, связанный с изменением формы ямы в электрическом поле, понижающий энергию поверхностного состояния у края ямы, где барьер составляет острый угол с дном ямы, и повышающий у края ямы, где барьер составляет острый угол с дном ямы относительно соответствующих краев ямы (рис. 2, 3).

Энергия поверхностного состояния, обозначенного цифрой *2* (в случае $S > 0$ — правого), увеличивается относительно центра ямы и наконец приближа-

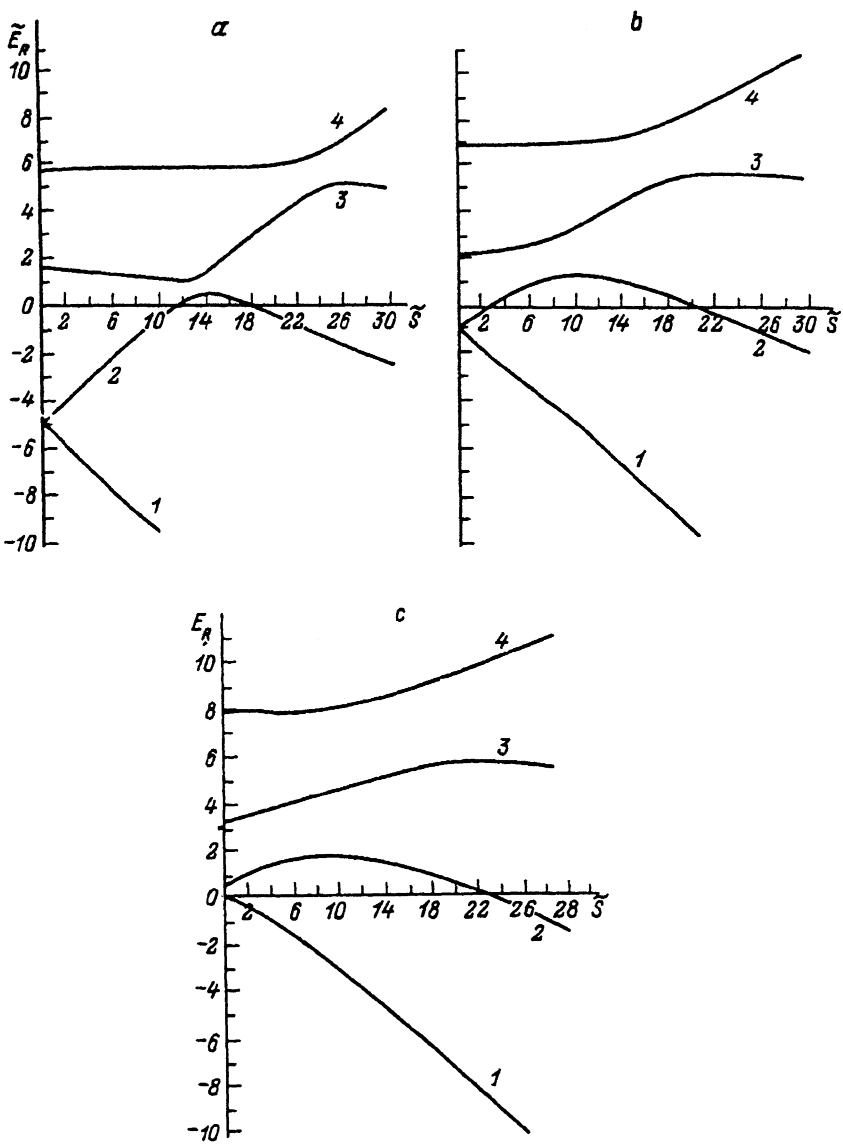

Рис. 2. Действительная часть нормированной энергии $\tilde{E}_R$ для $\tilde{V} = 25$ как функция нормированной напряженности электрического поля $\tilde{S}$, $\tilde{E}_S$: *a* — 5, *b* — 1, *c* — 0.01. Цифрами *1—4* обозначены разные энергетические состояния.

ется к энергии одного из уровней размерного квантования — *3*. С дальнейшим увеличением напряженности электрического поля сблизившиеся уровни энергии начинают удаляться друг от друга, но при этом *2* ведет себя как квантово-размерный уровень, а *3* — как уровень, локализованный на правой поверхности. Такие переходы хорошо заметны для случаев с достаточно большим $\tilde{E}_s$ (рис. 2, *a*; рис. 3, *a*, *b*). Непересечение уровней — результат того, что состояния смешиваются вблизи вырождения [10]. Значения $\tilde{S}$, при которых $|\tilde{E}_l - \tilde{E}_j|$

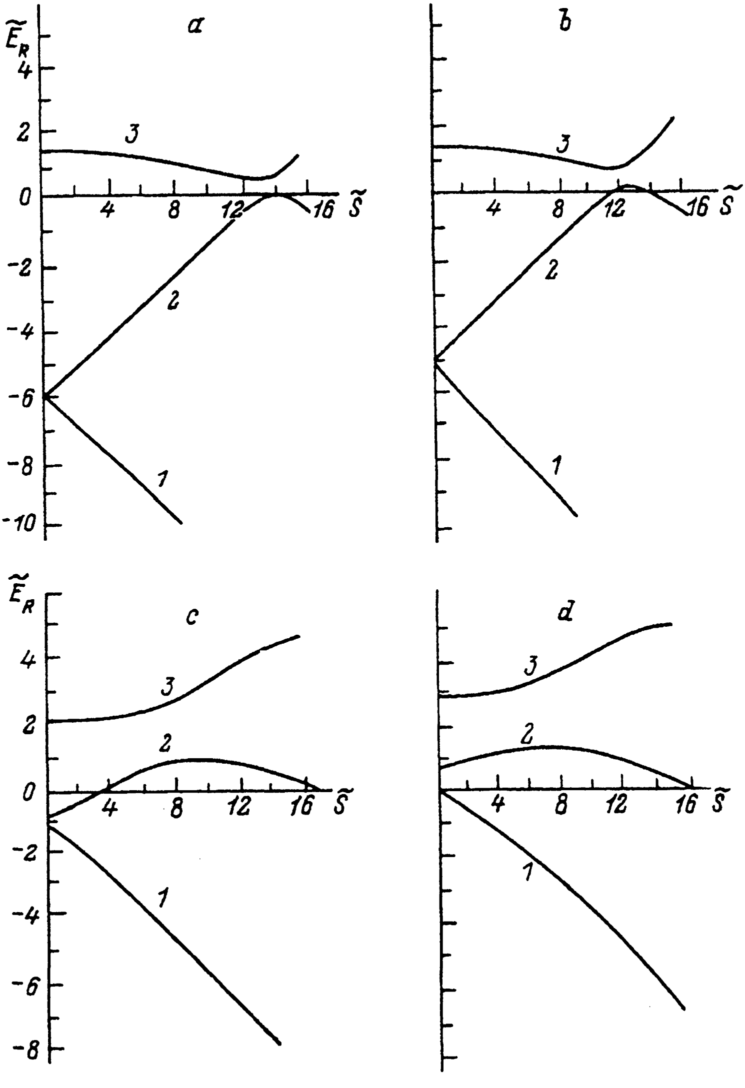

Рис. 3. Логарифм нормированной резонансной ширины $\tilde{\Gamma}$ для $\tilde{V}=25$ как функция нормированной напряженности электрического поля $\tilde{S}$, $\tilde{E}_S$: *a* — 5, *b* — 1, *c* — 0.01.
Цифры *1*—*4* обозначают то же, что и на рис. 2.

минимально, где I и J — номера соответствующих уровней (уровни пронумерованы в порядке возрастания энергии), обозначены $\tilde{S}_{I,\ J}$.

Зависимость $\tilde{\Gamma}$ ($\tilde{S}$) также имеет свои особенности в окрестности точек $\tilde{S}_{IJ}$. Как видно, на рис. 2, *a* $\tilde{\Gamma}_3$ становятся больше $\tilde{\Gamma}_4$ на участке после $\tilde{S}_{34}$, т. е. уровень с более высокой энегией E_4 характеризуется большим временем жизни $\tau_4=\hbar/\Gamma_4$, чем уровень с более низкой энергией E_3. И в этом нет ничего странного, так как на этом участке уровень *4* описывает локализованное поверхностное состояние, а уровень *3* — квантоворазмерный уровень. На рис. 5, *a*, *b*, *c* зависимости $\tilde{\Gamma}_2$ ($\tilde{S}$) и $\tilde{\Gamma}_3$ ($\tilde{S}$) ведут себя подобным же образом, но вдобавок к этому $\tilde{\Gamma}_3$ ($\tilde{S}$) имеет сразу после $\tilde{S}_{23}$ участок, на котором $\tilde{\Gamma}_3$

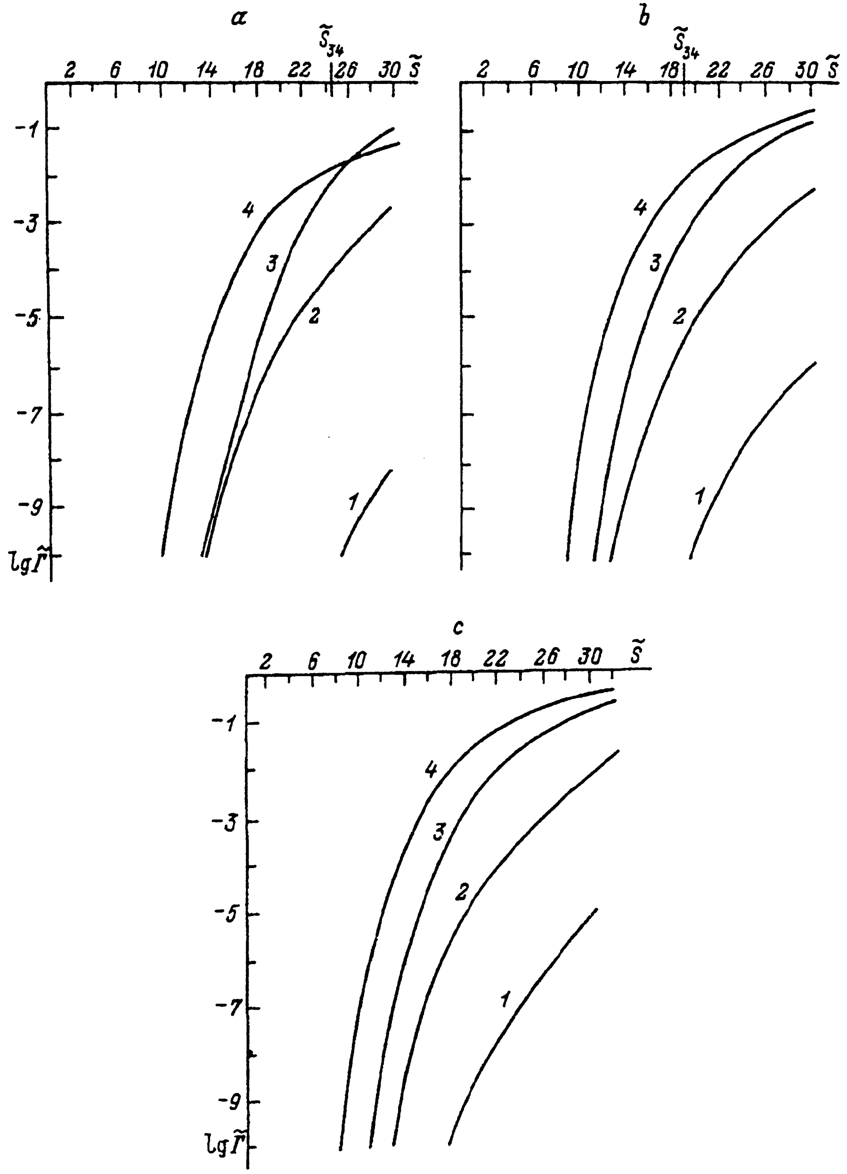

Рис. 4. Действительная часть нормированной энергии $\tilde{E}_R$ для $\tilde{V} = 5$ как функция нормированной напряженности электрического поля $\tilde{S}$, $\tilde{E}_S$: *a* — 6, *b* — 5, *c* — 1, *d* — 0.01.
Цифры *1*—*4* обозначают то же, что и на рис. 2.

уменьшается с ростом $\tilde{\Sigma}$, и, следовательно, τ_3 на этом участке растет с ростом S — очень необычная зависимость, которую также можно объяснить смешиванием состояний в окрестности $\tilde{S}_{23}$. Отметим, что $\tilde{E}_2$ и $\tilde{E}_3$ при $\tilde{S} = \tilde{S}_{23}$ находятся либо над ямой, либо у самого верха ямы для всех рис. 3, 5.

В отличие от зависимостей $\tilde{E}_R$ $(\tilde{S})$ зависимости $\tilde{\Gamma}$ $(\tilde{S})$ для систем, содержащих локализованные и делокализованные состояния, по-видимому, раньше не анализировались, и автор не располагает данными для сравнения с полученными результатами.

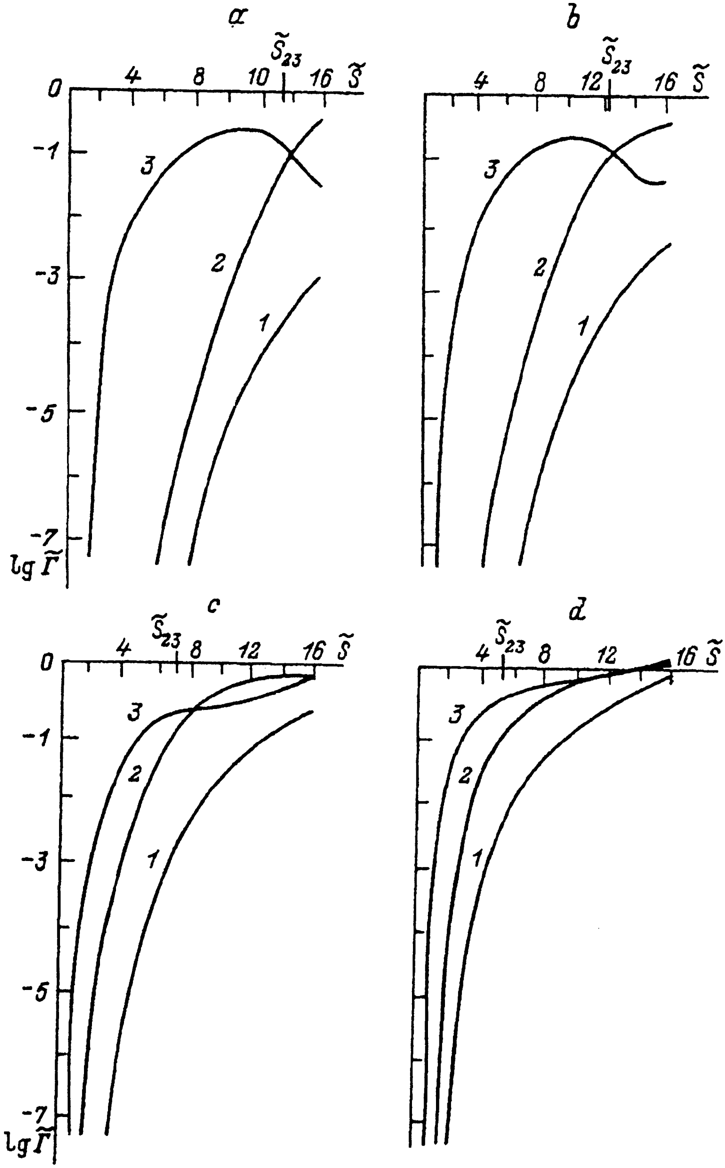

Рис. 5. Логарифм нормированной резонансной ширины $\tilde{\Gamma}$ для $\tilde{V} = 5$ как функция нормированной напряженности электрического поля $\tilde{S}$, $\tilde{E}_S$: *a* — 6, *b* — 5, *c* — 1, *d* — 0.01.
Цифры *1*—*4* обозначают то же, что и на рис. 2.

При малых значениях $\tilde{E}_s$ (мелкий уровень либо узкая яма) различия в поведении в электрическом поле поверхностных и квантоворазмерных состояний не столь заметны (рис. 2, *c*; 3, *c*; 4, *d*; 5, *d*).

Рассмотренные примеры свидетельствуют о том, что присутствие в яме таммовских состояний, возникающих на границе слоев с различными блоховскими функциями краев зон, вносит новые черты в зависимости от напряженности электрического поля энергетического спектра ямы и времени жизни электрона на различных уровнях.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] H. Ohno, E. E. Mendez, J. A. Brum, J. M. Hong, F. Agullo-Rueda, L. L. Chang, L. Esaki. Phys. Rev. Lett., **64**, 2555 (1990).
[2] F. Agullo-Rueda, E. E. Mendez, H. Ohno, J. M. Hong, Phys. Rev. B, **42**, 1470 (1990).
[3] H. Kromer, Oi-Gao Zhu. J. Vac. Sci. Techn., **21**, 551 (1982).
[4] Qi-Gao Zhu, H. Kroemer. Phys. Rev. B, **27**, 3519 (1983).
[5] В. Д. Шадрин. ФТП, **24**, 456 (1990).
[6] С. Г. Тиходеев. ЖЭТФ, **99**, 1871 (1991).
[7] D. Ahn, S. L. Chuhg. Phys. Rev. B, **34**, 9034 (1986).
[8] Д. Л. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика (нерелятивистская теория). М. (1989).
[9] Справочник по специальным функциям под редакцией М. Абрамовица, И. А. Стигуна. М. (1979).
[10] D. S. Hutching. Appl. Phys. lett., **55**, 1082 (1989).

Редактор Т. А. Полянская