Электронные резонансы в квантовой яме с периодически неровной границей

© В.А. Погребняк

Институт радиофизики и электроники Академии наук Украины,
310085 Харьков, Украина

E-mail: vpog@ire.kharkov.ua

(Поступила в Редакцию 2 октября 1998 г.
В окончательной редакции 5 марта 1999 г.)

Теоретически исследован спектр электронных состояний в бесконечно глубокой двумерной потенциальной яме, в которой одна стенка имеет периодически неровную форму. Показано, что в такой яме возникают небрэгговского типа резонансы — резонансы стоячих электронных волн, являющихся модами различных пространственных гармоник волновой функции электрона. Резонансы происходят в широком интервале энергий, начиная со значений, близких ко дну в каждой $2D$ подзоне. Резонансное взаимодействие приводит к расщеплению энергетического спектра и появлению запрещенных щелей, в связи с чем спектр электронов принимает минизонный характер. Свойства электронного газа существенным образом изменяются в соответствии с новым характером спектра.

Анализ электронных состояний в двумерных системах вызывает большой интерес в связи с широким использованием $2D$ систем в устройствах микроэлектроники, а также тесной связью это проблемы с исследованиями по квантовому эффекту Холла и ВТСП [1–3]. В устройствах микроэлектроники связь между электронной $2D$ подсистемой и внешними полями или внешней цепью часто осуществляется путем нанесения решетки на поверхность пленки с $2D$ газом [4–6]. В этом случае электроны подвергаются воздействию внешнего периодического потенциала, в связи с чем и возникает необходимость исследования спектра электронов в такой системе. Аналогичные задачи появляются при исследовании свойств двумерного электронного газа на границе гетероперехода при наличии дислокаций несоответствия или на границе зерен в мозаичных кристаллах. В первом случае дополнительный периодический потенциал возникает из-за присутствия дослокаций несоответствия [7], а во втором — благодаря краевым дислокациям, формирующим границу зерен и $2D$ канал на ней [8,9].

Конечно, здесь перечислены далеко не все случаи, приводящие к проблеме изучения спектра электронных состояний в $2D$ квантовой яме с периодически изменяющимися параметрами. Библиография по этой проблеме велика, поскольку она включает в себя огромное число работ по теории волноводов. Это связано с тем, что в математическом отношении постановки задач для электронных, электромагнитных и акустических волновых процессов во многом эквивалентны. Исследования волновых процессов в ограниченных периодических средах проводились в большей мере в теории электромагнитных и акустических волноводов [10–13].

При исследовании этой проблемы как в случае с электронной системой, так и в случае с волноводами основное внимание уделялось изучению волновых процессов вблизи брэгговских резонансов, поскольку считалось, что только в этом диапазоне энергий происходит наиболее эффективное взаимодействие волн с решеткой. Задача обычно решалась в приближении уравнения связанных мод [14,15], описывающего поведение системы вблизи брэгговских резонансов. Это приближение использовалось довольно часто при исследованиях волновых процессов в ограниченных периодических структурах [11–15]. Что же касается изучения поведения системы в области энергий, лежащих ниже энергии брэгговского резонанса, то этому вопросу уделялось значительно меньше внимания, так как считалось, что при этих энергиях взаимодействие волн с решеткой слабое и оно приводит лишь к незначительному сдвигу $2D$ уровней [16–18].

Однако проведенный в данной работе анализ проблемы в многомодовом приближении показывает, что в указанной области энергий возникают резонансы другого, небрэгговского типа, обусловленные взаимодействием мод различных пространственных гармоник волновой функции электрона. Эти резонансы приводят к существенному изменению спектра $2D$ системы, а следовательно, к появлению у них качественно новых физических свойств, создающих предпосылки расширения функциональных возможностей приборов микроэлектроники, в которых используются такие $2D$ структуры.

Анализ электронных состояний для полупространства, ограниченного аналогичной периодически неровной границей, проведен в работах [19,20].

1. Исходные уравнения

Исследуем электронные состояния в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной d, в которой одна стенка имеет одномерные периодические неровности, описываемые функцией $y(x) = \xi\cos(qx) \equiv y_0(x)$, где $q = 2\pi/a$, ξ и a — амплитуда и период неровностей. Таким образом, электрон находится в яме, ограниченной двумерным потенциалом $U(x, y)$

$$U(x,y)=\begin{cases}0, & d>y>y_0(x),\\ \infty, & y\geqslant y_0(x),\ \ y\leqslant d.\end{cases} \quad (1)$$

Собственные волновые функции $\Psi(x, y, z)$ и собственные значения энергии электрона E находятся из решения трехмерного стационарного уравнения Шредингера

$$\Delta\Psi+\frac{2m}{\hbar^2}\big[E-U(x,y,z)\big]\Psi=0 \quad (2)$$

совместно с граничными условиями на обеих границах

$$\Psi\big(x,y_0(x),z\big)=\Psi(x,d,z)=0. \quad (3)$$

Вследствие периодичности границы, решение будем искать в виде ряда Фурье

$$\Psi=\sum_n\big(a_n\cos(k_yy)+b_n\sin(k_yy)\big)$$
$$\times\exp\big[i(k_x+nq_z)x+ik_zz\big], \quad (4)$$

где k_x, k_y, k_z — компоненты волнового вектора электрона $\mathbf{k}$. Из уравнений Шредингера и (4) следует соотношение между E и $\mathbf{k}$

$$k_{yn}^2=\frac{2\pi E}{\hbar^2}-\big(k_x+nq_x\big)^2-k_z^2, \quad (5)$$

а граничные условия (3) накладывают связь между величинами k_x, k_z и k_{yn}, определяя тем самым закон дисперсии частицы $E(\mathbf{k})$.

Подставляя $\Psi\big(x,y_0(x),z\big)$ и $\Psi(x,d,z)$ в граничные условия, получим систему линейных алгебраических уравнений для коэффициентов a_n и b_n. Приравнивание нулю детерминанта этой системы позволяет найти разрешенные значения k_{yn}. В случае малых неровностей $\xi/d \ll 1$, $\xi d \ll 1$ можно ограничиться приближением первых десяти гармоник a_0, b_0, $a_{\pm1}$, $b_{\pm1}$ и т.д., пренебрегая гармониками $\sim\xi^2$. В результате получим следующее характеристическое уравнение, определяющее разрешенные значения k_{yn}:

$$\operatorname{tg}(dk_0)=\frac{\xi^2}{4}\Bigg\{\frac{k_0k_{-1}}{\operatorname{tg}(dk_{-1})}+\frac{k_0k_1}{\operatorname{tg}(dk_1)}$$
$$+\operatorname{tg}(dk_0)\bigg[\frac{k_1k_2}{\operatorname{tg}(dk_1)\operatorname{tg}(dk_2)}+\frac{k_{-1}k_{-2}}{\operatorname{tg}(dk_{-1})\operatorname{tg}(dk_{-2})}\bigg]\Bigg\}. \quad (6)$$

В уравнении (6) и далее мы опускаем индекс y у волновых чисел k_{yn}. Решение (6) будем искать методом последовательных приближений по ξ [19], т.е. $k_0=k_0^0+\delta k_0+\ldots$. При $\xi=0$ из (6) имеем $\operatorname{tg}(dk_0)=0$ и, следовательно,

$$k_0^0=\frac{s\pi}{d}\equiv k_{0s},\qquad s=1,2,3\ldots,$$
$$E=E_s+\frac{\hbar^2\left(k_x^2+k_z^2\right)}{2m},\quad E_s=\frac{\hbar^2s^2\pi^2}{2md^2}. \quad (7)$$

Это хорошо известные $2D$ подзоны в гладкой квантовой яме.

В следующем приближении, при $\xi\neq0$, получим искомую величину δk_0, которая будет описывать влияние периодической границы.

Решение уравжнения (6) будем искать в отдельных областях изменения волнового числа k_x. Сначала будет рассмотрена область $k_x=k_z=0$, т.е. будет найден сдвиг энергетических уровней. Затем при малых k_x ($k_x\ll q$) изменение спектра опишем в терминах эффективной массы, и, наконец, в наиболее интересном и важном случае — $k_x\sim d$, $k_x\sim q$ — будет описан резонанс стоячих электронных волн и минизонный характер спектра электронов.

2. Сдвиг энергетических уровней

При $k_x=k_z=0$ характеристическое уравнение (6) принимает вид

$$\operatorname{tg}(dk_0)=\frac{\xi^2}{2}k_1\operatorname{ctg}(dk_1)\big[k_0+k_2\operatorname{tg}(dk_0)\operatorname{ctg}(dk_2)\big],$$
$$k_1=\sqrt{k_0^2-q^2},\quad k_2=\sqrt{k_0^2-4q^2}. \quad (8)$$

Подставляя в правую часть этого уравнения нулевое решение (7), найдем поправки к волновым числам δk_0 и новые положения уровней энергии. Поведение системы качественно различно в областях $k_0\leqslant q$ и $k_0>q$. При $k\leqslant q$ имеем

$$\delta k_{0s}=\frac{\xi^2}{2d}k_{0s}k_{1s}\operatorname{cth}(dk_{1s}),\quad k_{1s}=\sqrt{q^2-k_{0s}^2},$$
$$E=E_s\left[1+\frac{\xi^2}{d}k_{1s}\operatorname{cth}(dk_{1s})\right]. \quad (9)$$

В области $k_0>q$ соответствующие формулы принимают вид

$$\delta k_{0s}=\frac{\xi^2}{2d}k_{0s}k_{1s}\operatorname{ctg}(dk_{1s}),\quad k_{1s}=\sqrt{k_{0s}^2-q^2},$$
$$E=E_s\left[1+\frac{\xi^2}{d}k_{1s}\operatorname{ctg}(dk_{1s})\right]. \quad (10)$$

Качественное различие решений в областях $k_0\leqslant q$ и $k_0>q$ обусловлено тем, что при $k_0\leqslant q$ волновое число первой гармоники $k_{\pm1}$ является мнимым числом. При этом гармоника представляет собой неоднородную волну, она приводит к сдвигу уровня энергии, но не дает вклад в интерференционные явления. При $k_0>q$ волновое число k_1 становится действительным, и рассматриваемая гармоника описывает волновой процесс, который, как видно из уравнений (10) и (8), при $k_{1s}=r\pi$, $r=1,2,3\ldots$ принимает резонансный характер. Если геометрические размеры квантовой ямы таковы, что для некоторого квантового состояния s выполняется соотношение $k_{1s} = r\pi$ или, если выразить через геометрические размеры ямы, —

$$(2d/a)^2 = s^2 - r^2, \qquad s > r \tag{11}$$

для какого-либо целого числа r, то такое s-е электронное состояние является резонансным. Уравнение (8) в этом случае сводится к квадратному, а его решение описывает расщепление данного энергетического уровня на два

$$E^{\pm} = E_s \left(1 \pm \sqrt{2}\,\frac{\xi}{d}\,\frac{r}{s}\right), \tag{12}$$

расстояние между которыми определяется соотношением

$$\delta E = 2\sqrt{2}\,\frac{\xi}{d}\,\frac{r}{s}\,E_s. \tag{13}$$

Еще раз подчеркнем, что резонансное состояние (12) возникает для квантовой ямы со специально подобранными геометрическими размерами, удовлетворяющими соотношению (11). При произвольных размерах ямы такое состояние возникать не будет.

3. Область малых k_x, $k_x \ll k_{1s}$

Если разложить выражение (6) по малому параметру, то с учетом (8)–(10) получим закон дисперсии вблизи минимума s-й $2D$ подзоны в таком виде

$$E(k_x, k_z) = E_s\Big[1 + \frac{\xi^2}{d} k_{1s}\,\mathrm{cth}(dk_{1s})\Big] + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m^*} + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}. \tag{14}$$

Влияние периодической границы сводится к изменению массы электрона, которая становится зависящей не только от периода неровностей, но и от ширины квантовой ямы

$$m^* = m\Bigg\{1 - \frac{\xi^2 q^2 k_{0s}^2}{2k_{1s}^2}\Bigg[\frac{dk_{1s}}{\mathrm{th}(dk_{1s})}\left(\frac{1}{\mathrm{sh}^2(dk_{1s})} + \frac{1}{d^2 k_{1s}^2}\right) - \frac{3}{2}\,\frac{1}{\mathrm{sh}^2(dk_{1s})}\Bigg]\Bigg\}. \tag{15}$$

Эффективная масса m^*, как и следовало ожидать, меньше массы свободного электрона, поскольку выражение в квадратных скобках в (15) всегда положительно.

В резонансном случае (11) эффективная масса становится значительно меньше

$$m^* = m\left(1 - \frac{8}{15}\,\xi^2 q^2 k_{0s}^2 d^2\right), \quad k_x q d^2 \ll 1, \tag{16}$$

что обусловлено более эффективным взаимодействием электрона с периодической границей в резонансном случае.

4. Резонансная область, $k_x \sim d$, $k_x \sim q$

Перейдем к анализу характеристического уравнения (6) в резонансной области. В нулевом приближении волновые числа $k_{\pm 1}$, фигурирующие в правой части (6), записываются в виде

$$k_{\pm 1} = \sqrt{\frac{s^2\pi^2}{d^2} \mp 2k_x q - q^2}. \tag{17}$$

Из уравнений (6) и (17) видно, что при $k_x = \pm q/2$ во всех $2D$ подзонах возникают обычные резонансы Брэгга, такие же как и в неограниченных периодических структурах. Поэтому не будем останавливаться на этом, а исследуем свойства, обусловленные движением частиц в направлении y.

Как видно из уравнений (6) и (17), общим условием резонансов является

$$k_{\pm} = \frac{l\pi}{d}, \qquad l = 1, 2, 3 \dots . \tag{18}$$

Из сопоставления (7) и (18) видно, что эти условия выражают резонанс стоячих волн, являющихся различными модами нулевой и первой пространственных гармоник волновой функции электрона.

Подставляя (17) в формулу (18), найдем значения волновых чисел $k_x^{\pm}$, при которых возникают резонансы стоячих волн между модами нулевой и $n = +1$ или $n = -1$ гармониками соответственно

$$k_x^{\pm} = \mp\frac{q}{2}(1 + \gamma_{sl}), \qquad \gamma_{sl} = \frac{(l^2 - s^2)\pi^2}{(dq)^2}. \tag{19}$$

Величина γ_{sl} зависит от параметров потенциальной ямы d, a, квантовых чисел s, l и может изменяться в широком интервале положительных и отрицательных чисел. В связи с этим резонансные $k_x^{\pm}$ могут принимать значения $k_x^{\pm} \to 0$ при $\gamma_{sl} \to -1$ в отличие от случая резонансов Брэгга, для которых $k_x^{\pm} = \mp q/2$ фиксированы. Вблизи резонансов уравнение (6) сводится к квадратному уравнению

$$\delta k_0^2 - \frac{\xi^2}{4d^2}\left(\frac{l\pi}{d}\right)^2 = 0, \tag{20}$$

которое дает два корня

$$\delta k_0^{\pm} = \pm\frac{\xi}{2d}\,\frac{l\pi}{d}. \tag{21}$$

Решение (21) описывает расщепление спектра при резонансе на два уровня E_{sl}^{+} и E_{sl}^{-}

$$E_{sl}^{\mp} = E_s\left(1 \pm \frac{\xi}{d}\,\frac{l}{s}\right) + E_B(1 + \gamma_{sl})^2 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \tag{22}$$

и появление запрещенной щели δE_{sl}

$$\delta E_{sl} = E_{sl}^{+} - E_{sl}^{-} = 2\frac{\xi}{d}\,\frac{l}{s}\,\frac{\hbar^2 k_{0s}^2}{2m}. \tag{23}$$

В выражении (22) введено обозначение $E_B = \hbar^2 q^2/8m$. В формулах (18)–(23) число l обозначает номер резонанса для s-й $2D$ подзоны.

Из (22) видно, что при $\gamma_{sl} \to -1$ и $k_z = 0$ резонансные значения энергий, отсчитанные от дна в каждой $2D$ подзоне, обращаются в нуль, т. е. резонансы происходят в широком интервале энергий, начиная с нулевой.

Ширина разрешенной зоны ΔE, соответствующая интервалу энергий между l и $l+1$ резонансами в s-й $2D$ подзоне, может быть найдена из формулы (22)

$$\Delta E = \frac{2(2l+1)\pi^2 E_B}{(qd)^2} \times \left\{1 + \frac{\pi^2\left|l^2 + (l+1)^2 - 2s^2\right|}{2(qd)^2}\right\}. \qquad (24)$$

Из (23) и (24) видно, что энергетический спектр электронов в квантовой яме с периодической границей принимает минизонный характер наподобие лестницы Ванье–Штарка [21]. Для широкой ямы, $qd \gg 1$, ширина одной минизоны мала $\Delta E \ll E_B$, т. е. в интервале энергий $0{-}E_B$ будет расположено большое число минизон.

Проведенное исследование показывает, что в двумерной квантовой яме с периодически неровной стенкой при малых амплитудах неровностей волновую функцию электрона можно представить в виде суперпозиции трех пространственных гармоник. Каждая гармоника характеризуется продольным k_x и поперечным k_y волновыми числами. В отличие от гладкой квантовой ямы, в которой k_x и k_y являются квантовыми числами, в гофрированной яме k_x и k_y связаны между собой характеристическим уравнением (6).

Волновые числа нулевой k_{0y} и первой $k_{\pm 1}$ гармоник могут принимать квазидискретные значения, определяемые решением характеристического уравнения (6). Эти значения k_{yn} определяют набор парциальных состояний электрона в квантовой яме с периодически неровной границей.

Волновое число k_{0y} незначительно отклоняется от дискретных значений, принимаемых в гладкой квантовой яме. Волновое число первой гармоники $k_{\pm 1y}$ изменяется в широких пределах, принимая действительные и мнимые значения при изменении k_x.

При некоторых значениях k_x волновые числа k_{0y} и $k_{\pm 1y}$ могут совпадать. В этом случае возникает резонансное взаимодействие соответствующих парциальных волн. Поскольку в направлении оси y электронные состояния описываются стоячими волнами, то данный резонанс является резонансом парциальных стоячих волн. Длина волны де Бройля, ассоциированная с движением электрона в направлении оси y, определяется соответствующим значением k_{yn}. Резонанс возникает между такими состояниями, для которых ширина квантовой ямы d одновременно кратна (но разным целым числам) полудлинам волн де Бройля, ассоциированных как с k_{0y}, так и с $k_{\pm 1y}$. Эти резонансы приводят к расщеплению энергетических уровней при соответствующих значениях волновых чисел k_x и появлению запрещенных щелей. Таким образом, спектр каждой $2D$ подзоны разбивается на минизоны, что приводит к существенному изменению физических свойств электронного газа в такой квантовой яме.

Список литературы

[1] Т. Андо, Ф. Фаулер, Ф. Стерн. Электронные свойства двумерных систем. Мир, М. (1985). 416 с.
[2] В.М. Локтев. ФНТ **22**, *1*, 3 (1996).
[3] Квантовый эффект Холла / Под ред. Р. Пренджа, С. Гирвина. Мир, М. (1989). 592 с.
[4] S.J. Allen, D.C. Tsui, R.A. Logan. Phys. Rev. Lett. **38**, *17*, 980 (1977).
[5] T.N. Theis, J.P. Kotthaus, P.J. Stiles. Solid. Stat. Commun. **26**, *1*, 603 (1978).
[6] D.C. Tsui, E. Gornik, R.A. Logan. Solid. Stat. Commun. **35**, *11*, 875 (1986).
[7] Н.Л. Бобров, Л.Ф. Рыбальченко, В.В. Фисун, И.К. Янсон, О.А. Миронов, С.В. Чистяков, В.В. Зорченко, А.Ю. Сипатов, А.И. Федоренко. ФНТ **16**, *12*, 1531 (1990).
[8] В.А. Погребняк, Д.Д. Халамейда, В.М. Яковенко. Письма в ЖЭТФ **46**, *4*, 167 (1987).
[9] В.А. Погребняк, И.М. Раренко, Д.Д. Халамейда, В.М. Яковенко. ФТП **32**, *3*, 319 (1998).
[10] Б.З. Каценеленбаум. Теория нерегулярных волноводов с медленно меняющимися параметрами. Изд-во АН СССР, М. (1961). 456 с.
[11] Д. Маркузе. Оптические волноводы. Мир, М. (1974). 361 с.
[12] С. Солименко, Б. Крозиньяни, П. Ди Порто. Дифракция и волновое распространение оптического излучения. Мир, М. (1989). 713 с.
[13] Интегральная оптика / Под ред. Т. Тамира. Мир, М. (1978).
[14] S.E. Miller. Bell System Techn. J. **33**, *3*, 661 (1954).
[15] H. Kogelnik. Bell System Techn. J. **48**, *9*, 2909 (1969).
[16] T. Tamir, H.C. Wang, A.A. Oliner. IEEE Trans. Microwave Theory and Techniques. MTT **12**, *3*, 323 (1964).
[17] C. Elachi, C. Yeh. J. Appl. Phys. **45**, *8*, 3494 (1974).
[18] В.Ф. Борулько. РЭ **30**, *10*, 1873 (1985).
[19] V.A. Pogrebnyak, V.M. Yakovenko, I.V. Yakovenko. Phys. Lett. **A209**, *1–2*, 103 (1995).
[20] В.А. Погребняк, В.М. Яковенко, И.В. Яковенко. ФТТ **39**, *10*, 1875 (1997).
[21] G.H. Wannier. Elements of Solid State Theory. Cambridge University Press, London (1959). 425 p.