

03,10

Пороговые эффекты в энергетическом спектре квазидвумерных электронов обогащенного слоя

© А.Я. Шульман, Д.В. Посвянский

Институт радиотехники и электроники им. В.А. Котельникова РАН,
Москва, Россия

E-mail: ash@cplire.ru

Поступила в Редакцию 26 апреля 2024 г.

В окончательной редакции 26 апреля 2024 г.

Принята к публикации 3 мая 2024 г.

Рассматривается задача об определении пороговых значений электрического поля F , при которых в обогащенном слое на поверхности полупроводника n -типа появляется новая подзона размерного квантования. Обсуждены представленные в литературе трудности такого определения в экспериментальных и вычислительных работах. Предложено объяснение имеющимся фактам как проявление квадратичной зависимости энергии E мелкого уровня от глубины потенциальной ямы вблизи порога рождения. Получены формулы пороговой зависимости $E(F)$ для случая параболической зоны проводимости в объеме полупроводника. Показана возможность применения порогового приближения не только к основной, но и к возбужденным подзонам. При непараболической зоне проводимости рассмотрен пороговый характер в зависимости энергии размерно-квантованного уровня от квазиимпульса k_{\parallel} вдоль поверхности. С параметрами n -InAs выполнены численные расчеты двумерных спектров в условиях появления основной подзоны, первой и второй возбужденных. Проведен их анализ на основе полученных формул. Предложен метод определения порога рождения подзоны по имеющимся данным из области выше порога. Обнаружена и исследована неустойчивость самосогласованного решения системы из уравнения Пуассона и уравнения эффективной массы в случае второй возбужденной подзоны. Приведены доводы в пользу интерпретации этой неустойчивости как свидетельства формирования в обогащенном слое двумерных подзон валентного типа с отрицательной массой. Обсуждается возможная связь появления такого спектра в глубокой потенциальной яме, сравнимой с шириной запрещенной зоны, с предположением Л.В. Келдыша о природе амфотерности примесей, создающих глубокие уровни в запрещенной зоне полупроводника.

Ключевые слова: полупроводники, низкоразмерные структуры, обогащенный слой, двухзонная модель Кэйна, уравнение эффективной массы, пороговые явления в двумерном спектре.

DOI: 10.61011/FTT.2024.06.58254.109

1. Введение

При создании обогащенного слоя на поверхности полупроводника n -типа в структуре металл–диэлектрик–полупроводник число заселенных размерно-квантованных подзон определяется экспериментально по зависимости поверхностной плотности n_s электронов от потенциала V_g металлического затвора. При появлении новой подзоны число электронов в ней относительно мало и плохо определяется. Поэтому значение V_{gc} , когда появляется новая подзона, находится экстраполяцией, обычно линейной, измеренной зависимости $n_s(V_g)$ к нулю (см. например [1], рис. 3 и 9). При этом обнаруживается, что квазидвумерные электроны существуют при $V_g < V_{gc}$. Общепринятого объяснения этому наблюдению не было дано.

Если обогащенный электронами слой вблизи поверхности образуется при адсорбции положительных ионов вследствие формирования области загиба зон, то число размерно-квантованных подзон определяют либо экспериментально методом фотоэлектронной спектроскопии, что сложно, либо решая уравнение эффективной массы. В последнем случае для электронов с непараболической

зоной проводимости возникает зависимость энергии уровней размерного квантования по нормали к поверхности от латеральной компоненты квазиимпульса k_{\parallel}^2 вдоль поверхности. При загибе зон, отвечающем началу отщепления от непрерывного спектра подзоны размерного квантования, расчет двумерного энергетического спектра показывал существование двумерной подзоны, спектр которой начинался от некоторого критического значения $k_{\parallel c} > 0$ [2]. В качестве объяснения выдвигалось предположение о возможном существовании размерно-квантованных подзон, минимум которых расположен при $k_{\parallel c} \neq 0$.

Однако в обоих описанных случаях при появлении новой подзоны ее минимум обязательно будет расположен вблизи границы непрерывного спектра и ему должна отвечать малая энергия связи. В таких случаях следует ожидать квадратичной зависимости энергетического спектра от глубины потенциальной ямы, характерной для порогового эффекта ([3] Гл. I, § 2). Это затрудняет раннее обнаружение мелкого состояния при увеличении глубины потенциальной ямы с ростом k_{\parallel} от нуля, как было отмечено в [4]. Важно, что правильное определение момента появления новой подзоны в двумерном спектре

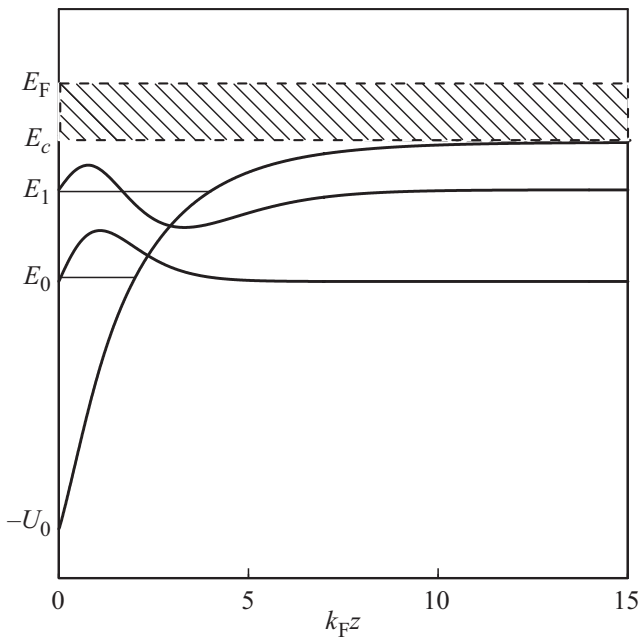


Рис. 1. Потенциал квантовой ямы обогащенного слоя, положение минимумов двух подзон и соответствующие им нормированные на единицу волновые функции. E_c и E_F отмечают положение дна зоны проводимости и уровня Ферми в объеме, U_0 — загиб зон на поверхности. Отсчет энергий от дна зоны проводимости в объеме.

влияет не только на количественную оценку плотности квазидвумерных электронов, но и позволяет учитывать канал межподзонного рассеяния, даже если заполнение новой подзоны еще не проявляется, например, в спектре магнитоосцилляций.

Имеющиеся в литературе примеры теоретического рассмотрения пороговых зависимостей ограничены только порогом вхождения основного состояния в дискретный спектр на примере прямоугольной или достаточно локализованной потенциальной ямы. В настоящей работе теория обобщена на случай появления возбужденных состояний, чтобы также иметь возможность точно определять момент рождения новой возбужденной подзоны в двумерном спектре. Этот случай отличается тем, что волновая функция n -ого возбужденного уровня имеет в области ямы между точками поворота n узлов и, соответственно, существенно уклоняется от нуля в промежутках между узлами (см. рис. 1). В отличие от ненормированной волновой функции мелкого основного состояния, которая при нулевом граничном условии на стенке ямы остается малой везде вплоть до точки поворота.

Кроме того, возбужденные состояния появляются в потенциальной яме, когда ее глубина существенно больше глубины, которая имеет место при появлении основного состояния дискретного спектра. Оба эти фактора увеличивают долю интеграла по области потенциальной ямы в нормировке собственной функции соответствующего состояния относительно вклада асимптотической

окрестности бесконечности, где собственная функция убывает экспоненциально. В то же время малость вклада от интеграла по области ямы обычно считается основным условием применимости порогового приближения к зависимости спектра от глубины потенциальной ямы.

Второе отличие потенциала обогащенного слоя от модельных прямоугольных или хорошо локализованных потенциалов — медленное, как $1/z^2$, убывание при удалении от поверхности самосогласованного потенциала с наложенными фриделевскими осцилляциями (см. численный расчет в [5], рис. 4 и 9). Как следует из результатов работы [6], такое поведение на больших расстояниях есть универсальное следствие экранирования поверхностного заряда вырожденным электронным газом. Поэтому в случае потенциала, полученного решением самосогласованной системы уравнений Пуассона и Шредингера, требуется определить, что такое граница ямы и где начинается асимптотическое экспоненциальное убывание решения. Оба элемента существенно используются при выводе зависимости энергии от глубины ямы вблизи порога рождения нового состояния в дискретном спектре.

Заметное отличие волновых функций от нуля в яме для возбужденных состояний с малой энергией потребовало рассмотреть первую поправку к пороговым формулам, которое учитывает конечное отношение вклада в нормировочный интеграл области ямы к вкладу области экспоненциального убывания. Это позволяет расширить область применения пороговых формул для определения момента появления мелкого состояния. Теоретические формулы проверены методом численного моделирования при расчете энергетического спектра квазидвумерных электронов в обогащенном слое на поверхности полупроводника типа вырожденного n -InAs.

В настоящее время имеется некоторое число работ, в которых предположение о существовании подзоны двумерного спектра, начинающейся при $k_{||} \neq 0$, используется для построения физической картины наблюдаемых экспериментальных фактов или интерпретации результатов теоретических расчетов в терминах „кинематического связывания“ либо барьера, образованного зависящей от координат эффективной массой (см. [7–9] и ссылки там). Поэтому представляется важным установить реальность существования такого необычного спектра.

В настоящей работе предпринята попытка ответить на поставленные вопросы методом численного моделирования при значениях параметров полупроводника с вырожденным электронным газом, близких к исследуемым экспериментально. Все расчеты, результаты которых представлены в следующих разделах, велись с параметрами электронного газа для типичного прямозонного полупроводника, в качестве которого был выбран n -InAs с концентрацией доноров $N_+ \sim 1 \cdot 10^{17} \text{ cm}^{-3}$. Для остальных параметров приняты те же значения, что и в работе [4]: эффективная масса электронов $m^* = 0.023$, ширина запрещенной зоны $E_g = 430 \text{ meV}$, диэлектрическая проницаемость $\epsilon = 12.6$.

В разделе „Параболическая зона проводимости“ используются в основном эффективные атомные единицы $e^* = m^* = \hbar = 1$. Связь $a.e.^*$ с обычными атомными единицами $a.e.$ указана в формулах (3.4) в [4]. В разделе „Непараболическая зона проводимости“ используются обычные атомные единицы.

В некоторых случаях удобнее нормировать энергетические величины на энергию Ферми идеального электронного газа указанной концентрации, пространственные координаты — посредством умножения на квазиимпульс Ферми. Как правило, эта нормировка указывается в явном виде.

2. Пороговые эффекты в спектре квазидвумерных электронов при параболической зоне проводимости в объеме полупроводника

2.1. Постановка задачи

Рассматривается прямозонный полупроводник n -типа с вырожденным электронным газом в объеме в условиях, когда к поверхности приложено притягивающее электроны электрическое поле, порожденное либо зарядом адсорбированных на поверхности положительных ионов, либо напряжением на металлическом затворе, отделенном от поверхности диэлектрической пленкой. Зонная диаграмма такой структуры представлена на рис. 1. Энергетический спектр этой задачи рассчитан методом, описанным в [4], в результате решения самосогласованной системы уравнений для волновых функций Ψ_E и электростатического потенциала ϕ (в размерных единицах)

$$-\frac{\hbar^2}{2m^*} \Delta \Psi_E(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}) \Psi_E(\mathbf{r}) = E \Psi_E(\mathbf{r}), \quad (1)$$

$$-\epsilon \nabla^2 \phi(\mathbf{r}) = 4\pi e(N_+ - N(\mathbf{r})), \quad (2)$$

$$N(\mathbf{r}) = 2 \int_{E \leq E_F} \mathcal{D}\{E\} |\Psi_E(\mathbf{r})|^2, \quad (3)$$

при заданных краевых условиях на собственные функции Ψ_E и потенциал ϕ . Здесь $U(\mathbf{r}) = -e\phi(\mathbf{r})$ — потенциальная энергия электрона, E — энергия состояния, через \mathcal{D} обозначается дифференциальная спектральная мера по энергетическому спектру, интегрирование ведется по всем заполненным состояниям, включая размерно-квантованные подзоны.

2.2. Формулы порогового эффекта

Обычно рассматривается уравнение Шредингера, в котором потенциальная энергия пропорциональна параметру λ . В случае прямоугольной ямы ее глубина оказывается прямо пропорциональна этому параметру. Если при некотором пороговом значении λ_t в энергетическом

спектре уравнения Шредингера появляется собственное значение $E = 0$, то при дальнейшем увеличении λ в яме имеется мелкий уровень, энергия связи которого квадратично зависит от расстройки $\lambda - \lambda_t$. Такая зависимость может быть выявлена в случае многих видов потенциальной ямы, для которых существуют явные решения соответствующего уравнения Шредингера. Это наводит на мысль о существовании зависимости порогового типа в случае потенциальной ямы достаточно произвольного вида при некоторых условиях.

Если конкретизация потенциала ямы ограничивается требованием, чтобы уравнение Шредингера имело собственное значение $E = 0$, потенциал достаточно быстро убывал к нулю на бесконечности и был пропорционален параметру λ , то доказательство порогового поведения уровня в зависимости от расстройки $\lambda - \lambda_t$ проведено двумя способами в [10] (зад. 4.27). К сожалению, этот вывод ошибочен, и правильный результат получен после необоснованных допущений. Поэтому будем следовать первоначальной идее порогового явления, как она была сформулирована в статье Бете и Пайерлса [11]. При этом используется слабая зависимость волновой функции мелкого состояния от энергии в области ямы и явный вид зависимости волновой функции от энергии вдали от ямы в области, которая дает главный вклад в нормировочный коэффициент. Близкие соображения используются также в теории рассеяния медленных частиц на потенциальной яме с мелким уровнем (см. [12] и гл. IX в [3]).

Вывод пороговой зависимости энергии связи без ограничения линейной зависимостью потенциала ямы от параметра, был представлен в [13]. Здесь будут воспроизведены только формулы, необходимые как исходные для дальнейших преобразований.

Пусть уравнение Шредингера (в атомных единицах) с зависящим от параметра λ потенциалом $U(z, \lambda)$

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dz^2} + U(z, \lambda) \right] \Psi_{E(\lambda)}(z) = E(\lambda) \Psi_{E(\lambda)}(z) \quad (4)$$

имеет собственное значение $E(\lambda_t) = 0$ при некотором значении параметра λ_t . Задача рассматривается на полуоси $0 \leq z < \infty$ с краевыми условиями

$$\Psi_E(0) = 0, \quad \lim_{z \rightarrow \infty} \Psi_E(z) < \text{const}. \quad (5)$$

Относительно потенциала считается выполненным асимптотическое условие

$$\lim_{z \rightarrow \infty} U(z, \lambda) \propto 1/z^{2+\alpha}, \quad \alpha > 0,$$

благодаря чему два линейно независимых решения уравнения (4) при $E = 0$ имеют в бесконечности асимптотику $\sim \text{const}$ и $\sim z$ согласно теореме Шпета [14]. Если решение Ψ_0 остается ограниченным на бесконечности, то $E = 0$ — собственное значение и Ψ_0 — собственная функция.

Для упрощения записи введем обозначения собственных функций как векторов гильбертова пространства

$$\Psi_0(z) = |0\rangle, \quad \Psi_{E(\lambda)}(z) = |E\rangle. \quad (6)$$

Так как исследуется зависимость энергии E от параметра λ вблизи порога, разложим потенциал как функцию λ в ряд в окрестности точки λ_t с точностью до членов первого порядка

$$U(x, \lambda) = U(z, \lambda_t) + \frac{dU(z, \lambda)}{d\lambda} (\lambda - \lambda_t). \quad (7)$$

Далее, уравнение (4) при $\lambda = \lambda_t$ проектируется на состояние $|E\rangle$, при параметре λ — на состояние $|0\rangle$ и из второго вычитается первое. С учетом самосопряженности исходного уравнения получаем

$$(\lambda - \lambda_t) \left\langle 0 \left| \frac{\partial U}{\partial \lambda} \right| E \right\rangle = E(\lambda) \langle 0|E \rangle. \quad (8)$$

Благодаря условию локальности потенциальной энергии $U(z, \lambda)$ и малости собственного значения $E(\lambda)$, основной вклад в скалярное произведение $\langle 0|E \rangle$ дает область вне потенциальной ямы, где нормированные собственные функции известны в явном виде и равны соответственно,

$$\Psi_0(z) = C_0, \quad \Psi_E(z) = C_E \exp(-\kappa z). \quad (9)$$

Нормировочные константы, вычисленные при таком же пренебрежении вкладом ямы, равны $C_0 = 1/\sqrt{2\pi}$ [15] и $C_E = \sqrt{2\kappa}$, $\kappa = \sqrt{2|E|}$, $E = -\kappa^2/2$.

Вычислив скалярное произведение в правой части (8) и восстановив явное выражение для матричного элемента в левой части, приходим к формуле

$$\frac{-\kappa^2}{2\kappa} = (\lambda - \lambda_t) \int_0^\infty dz \frac{\Psi_0(z)\Psi_E(z)}{C_0C_E(\kappa)} \frac{\partial U}{\partial \lambda} \Big|_{\lambda_t}, \quad \lambda > \lambda_t. \quad (10)$$

После очевидных преобразований отсюда получаем выражение для энергии нового уровня вблизи порога его появления в потенциальной яме

$$E(\lambda) = -2 \left[\int_0^\infty dz \frac{\Psi_0(z)\Psi_E(z)}{C_0C_E(\kappa)} \frac{\partial U}{\partial \lambda} \Big|_{\lambda_t} \right]^2 (\lambda - \lambda_t)^2, \quad \lambda > \lambda_t. \quad (11)$$

Эта формула отличается от обычно получаемой квадратичной зависимости энергии связи от параметра вблизи порога тем, что энергия явно зависит от матричного элемента производной потенциала по параметру λ . Нормировочный коэффициент $C_E(\kappa)$ существенно зависит от энергии. Однако после деления на нормировочные константы решения уравнения Шредингера не будут зависеть от энергии E в области ямы и близки между собой благодаря одинаковому начальному условию $\Psi_E(0) = 0$ и малости энергии E относительно потенциальной энергии U (см. уравнение (4)).

Кроме того, под интегралом сохранено различие собственных функций для двух собственных значений энергии, чем обычно пренебрегают и сводят интеграл к среднему значению потенциала по собственной функции для нулевого собственного значения. Последнюю полагают в области ямы постоянной, равной единице [16].

Если первое приближение (до нормировки $\Psi_\lambda \simeq \Psi_\lambda$ в области ямы) выполняется с достаточной точностью во всех случаях, то второе будет неверно, если рассматривается появление в яме очередного $n + 1$ связанного состояния в дополнение к имеющимся уже n , так как при $E_{n+1} = 0$ и близких значениях этого параметра все решения будут иметь в области ямы $n + 1$ узлов в дополнение к нулевому граничному условию. В результате квадрат волновой функции даже мелкого возбужденного состояния будет принимать в области потенциальной ямы большие положительные значения и вносить заметный вклад в нормировочные интегралы, а также в интеграл перекрытия $\langle 0|E \rangle$ в правой части формулы (8).

Чтобы распространить пороговое приближение на случай возбужденных состояний, следует рассмотреть следствия отказа от условия, что значения нормировочного интеграла и интеграла перекрытия формируются не в области потенциальной ямы, а в асимптотической области экспоненциального убывания на бесконечности. Разобьем интеграл перекрытия на два слагаемых и оценим вклад каждого в формулу пороговой зависимости

$$\begin{aligned} \langle 0|E \rangle &= \int dz \Psi_0(z)\Psi_E(z) \\ &= C_0C_E \left[\int_0^{z^*} dz \frac{\Psi_0(z)\Psi_E(z)}{C_0C_E} + \frac{1}{\kappa} e^{-\kappa z^*} \right] \\ &= C_0C_E \left[I^{qw}(z^*) + \frac{1}{\kappa} + \frac{1}{\kappa} (e^{-\kappa z^*} - 1) \right]. \quad (12) \end{aligned}$$

Через $I^{qw}(z^*)$ обозначен вклад в интеграл от области потенциальной ямы. Константы C_0, C_E учитывают здесь отличия собственной функции $\Psi_0(z^*)$ от единицы и $\Psi_E(z^*)$ от $\exp(-\kappa z^*)$ (см. (9)). Подставив (12) в равенство (8), получим вместо (10)

$$\begin{aligned} \frac{-\kappa^2}{2} \left[I^{qw}(z^*) + \frac{1}{\kappa} (e^{-\kappa z^*} - 1) \right] + \frac{-\kappa}{2} \\ = (\lambda - \lambda_t) \int_0^\infty dz \frac{\Psi_0(z)\Psi_E(z)}{C_0C_E} \frac{\partial U}{\partial \lambda} \Big|_{\lambda_t}, \quad \lambda > \lambda_t. \quad (13) \end{aligned}$$

Константа затухания κ считается малым параметром теории. Поэтому первое слагаемое в левой части является величиной второго порядка малости. Интеграл перекрытия не может быть больше нормировочного и даже после деления на константы C_0, C_E останется порядка единицы. Самым большим числом в квадратных

скобках может быть эффективный размер ямы z^* , но он умножается на малый параметр — энергию связи. Таким образом из формулы (13) следует, что при условии $\kappa^2 z^* < 1$ должна существовать некоторая окрестность значений параметра λ около порога, в которой сохраняется обычная формула пороговой зависимости.

Отметим, что при условии слабой зависимости квадратной скобки в левой части (13) и интеграла в правой части от энергии $E = -\kappa^2/2$, а значит и от λ , равенство (13) определяет параметр λ как параболическую функцию от κ . Это позволяет, в принципе, методом наименьших квадратов определить параметры параболы и найти пороговое значение параметра λ_t . Однако удобнее это делать в области линейной зависимости между κ и λ , если такая достаточно хорошо выражена. Во всяком случае формула (13) расширяет возможность точного определения порога появления нового уровня. Далее на результатах численного моделирования будет видно, что область линейной зависимости $\lambda(\kappa)$ существует даже в самосогласованной потенциальной яме и вполне достаточна для определения пороговых величин.

2.3. Результаты численного эксперимента

На рис. 2 показаны результаты самосогласованного расчета зависимости энергетического спектра квазидвумерных электронов в обогащенном слое от приложен-

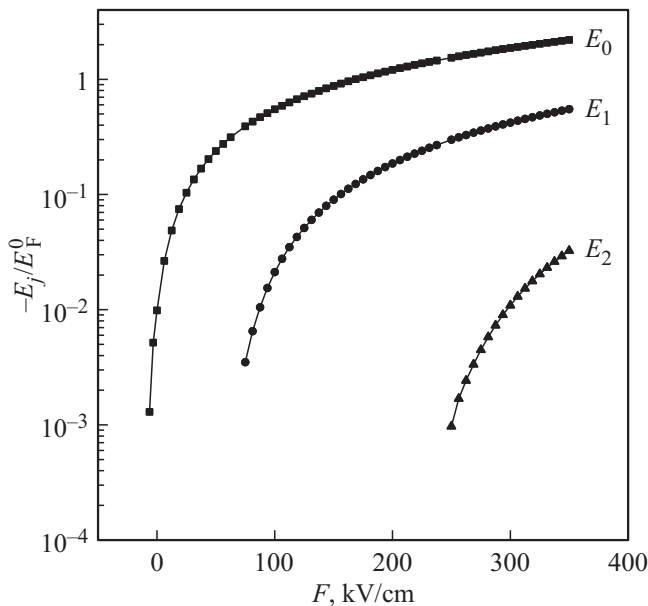


Рис. 2. Положение минимумов подзон энергетического спектра квазидвумерных электронов в обогащенном слое полупроводника n -типа как функция приложенного к поверхности электрического поля. Для появления мелкой основной подзоны, E_0 , к поверхности надо было приложить отрицательное поле, чтобы уменьшить глубину самосогласованной потенциальной ямы Константинова–Шика вплоть до исчезновения уровня размерного квантования (см. обсуждение этого явления в [5], раздел 3.1).

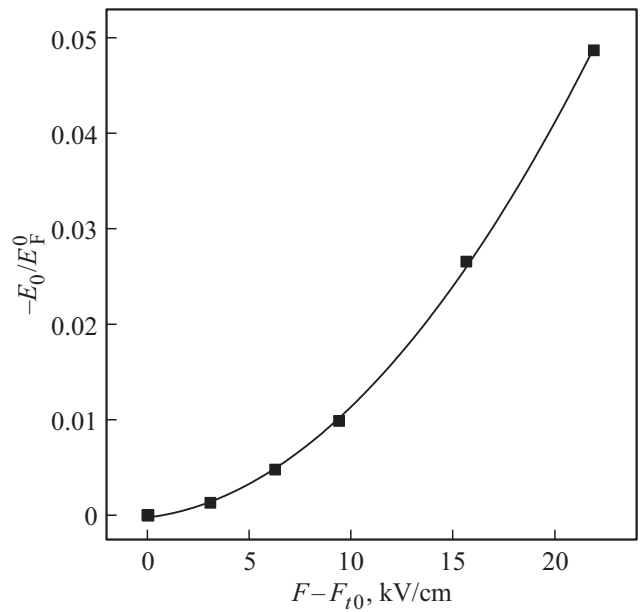


Рис. 3. Определение порогового поля F_{t0} появления основной подзоны подбором параметров параболической зависимости по формуле (11) методом наименьших квадратов по четырем рассчитанным точкам (черные квадраты при $F - F_{t0} > 0$). Пороговое поле определялось подбором положения пятой точки с учетом требования, чтобы минимум параболы лежал на оси абсцисс. $F_{t0} = -10.4$ kV/cm.

ного к поверхности электрического поля F . Видно, что с увеличением напряженности электрического поля появляются все новые подзоны размерного квантования. В небольшой окрестности значений поля, где появляется новая подзона, итеративное решение самосогласованной системы уравнение Пуассона–уравнение Шредингера перестает сходиться и на кривых в соответствующих местах появляются лакуны.

Механизм этой потери сходимости при появлении мелкого связанного состояния разобран в [5] (конец секции 3.2) и в [4] (Приложение А). Здесь мы покажем, что пороговая теория позволяет определить значения полей, при которых в двумерном спектре возникает новая подзона. Хотя точно при таких значениях самосогласованный расчет электронного спектра невозможен.

На рис. 3 приведен результат подбора значения порогового поля для основной подзоны E_0 , изображенной на рис. 2. Четыре точки при конечных значениях расстройки $F - F_c$ взяты с рассчитанной кривой E_0 . Поле F_c , определяющее положение пятой точки, подбиралось так, чтобы проведение параболы по пяти точкам методом наименьших квадратов давало в результате кривую, касающуюся оси абсцисс. С определенной точностью это сделать удалось, но в отсутствие программной реализации процесс оказался достаточно утомительным.

Однако формула (10) и, тем более, (13) наводят на мысль, что удобнее будет использовать участок линейной зависимости постоянной затухания κ от параметра,

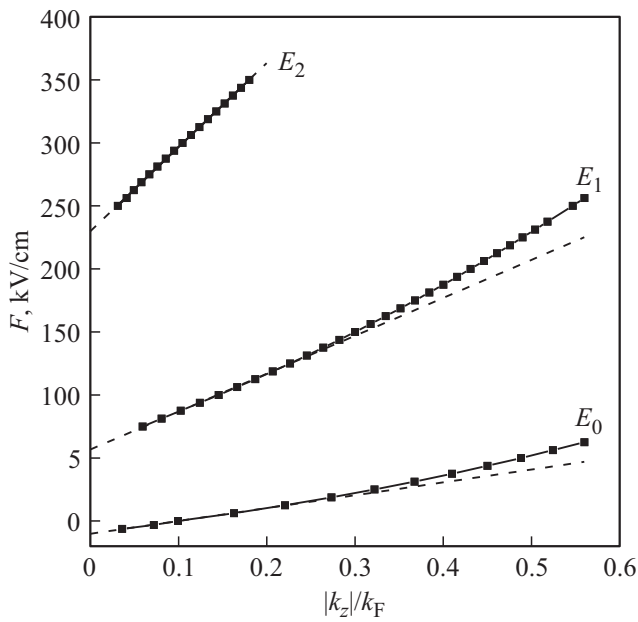


Рис. 4. Перестроенные в соответствующих координатах начальные участки кривых, представленных на рис. 2.

в данном случае поля F , на плоскости (κ, F) . Затем экстраполяция прямой к точке, где $\kappa = 0$, позволит определить пороговое поле F_{i0} для основной подзоны. Реализация такого построения представлена на рис. 4, где постоянная затухания экспоненты заменена нормированной величиной $|k_z|/k_F$.

В табл. 1 собраны результаты экстраполяции. В третьей колонке таблицы указаны минимальные значения полей, начиная с которых самосогласованный итеративный расчет позволяет находить энергию минимума для данной подзоны. На рис. 4 видно, что линейная зависимость сменяется нелинейной при параметре затухания порядка 0.3. В соответствии с формулой (13), отсюда можно оценить величину коэффициента при квадрате постоянной затухания.

Во всяком случае при параметрах проведенного расчета, которые, как показано в [4], близки к характеристикам реальных объектов, область чисто пороговой линейной зависимости вполне заметна и может быть использована для уточнения пороговых значений полей.

Зная достаточно точно величины пороговых полей, можно рассмотреть положение минимумов подзон в гораздо большем масштабе изменений поля. Результат

Таблица 1. Пороговые поля для трех подзон рис. 2, определенные из рис. 4

Номер подзоны	Уравнение прямой рис. 4	Пороговое поле F_i , kV/cm	Минимальное поле, kV/cm
E_0	$E_0 = 105.3 k_z - 10.4$	-10	-6.5
E_1	$E_1 = 300.9 k_z + 56.7$	57	75
E_2	$E_2 = 667.9 k_z + 229.8$	230	250

такого подхода показан на рис. 5. Видно, что характерная для пороговых явлений квадратичная зависимость энергии связи от параметра, меняющего глубину ямы, занимает примерно полтора порядка и вполне может использоваться для уточнения порогового поля по экспериментальным данным.

В заключение этого раздела на рис. 6 показан результат проверки применимости пороговой теории к энергии уровня, локализованного в самоорганизующейся потенциальной яме Константинова–Шика. Детали расчета спектра описаны в работе [5]. Зависимость глубины эффективной потенциальной ямы теории функционала плотности от параметра затухания волновых функций в объеме построена по кривым под номером 1 на рис. 4, *a, b* из статьи [5]. Зависимость энергии уровня от R_s , кривая 1(б), была уточнена в [4], рис. 11.

Наличие прямолинейного участка на рис. 6 ясно свидетельствует, что пороговое приближение справедливо в некоторой окрестности момента появления связанного состояния и в случае нелинейной зависимости решения уравнения Пуассона от параметра — плотность положительного фона.

Аппроксимация рассчитанной зависимости прямой линией позволяет, в принципе, ответить на вопрос, поставленный в работе [17], о границе существования такого связанного состояния. Для этого из рис. 6 следует найти значение U_0 и соответствующее ему значение R_s , при котором $|k_z| = 0$.

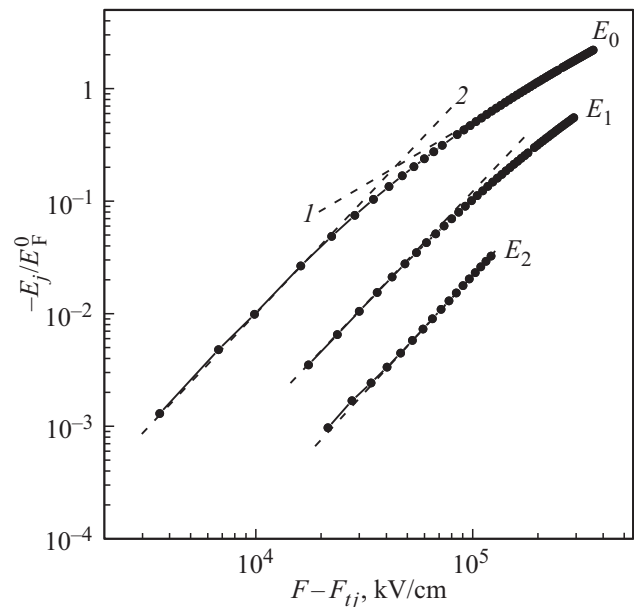


Рис. 5. Энергии минимумов трех рассчитанных подзон размерного квантования, представленных на рис. 2, построенные в зависимости от превышения порогового значения поля для каждой подзоны. Штриховые линии показывают наклоны степенной зависимости энергии минимума от расстройки. Цифра 2 отмечает параболический наклон, соответствующий пороговой формуле (11). Цифра 1 — обычно наблюдаемая линейная зависимость. Пороговые поля приведены в табл. 1.

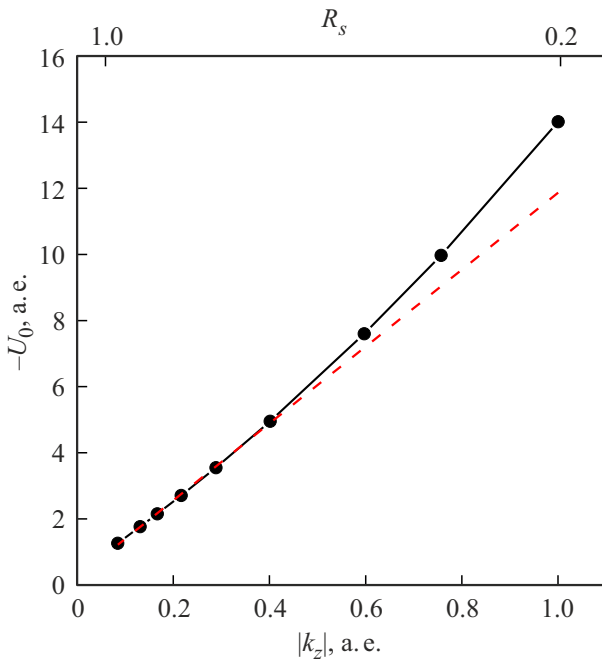


Рис. 6. Зависимость минимума U_0 потенциала в самоорганизующейся потенциальной яме вблизи непроницаемой границы вырожденного электронного газа от постоянной затухания волновой функции в объеме. Энергия уровня $E = -|k_z|^2/2$.

3. Непараболический энергетический спектр зоны проводимости полупроводника

Рассматривается случай энергетического спектра квазидвумерных электронов обогащенного слоя на поверхности прямозонного полупроводника при учете конечной ширины E_g запрещенной зоны в рамках двухзонной модели Кэйна. При расчетах спектров используется уравнение эффективной массы для непараболической зоны проводимости [18], метод решения которого описан в [4]. Закон дисперсии $E_j(k_{\parallel}, k_z)$, в отличие от параболического случая, нетривиально зависит от компонент k_{\parallel} квазиимпульса вдоль поверхности полупроводника из-за зависимости энергии связи k_z^2 от k_{\parallel} (см. [4], рис. 7, b).

Электростатическая потенциальная энергия $U(z)$ электронов входит в уравнение эффективной массы при $E_g \neq 0$ через зависящий от энергии E квазипотенциал $U_{qp}(U, E)$. Как следствие, пороговые эффекты в этом случае определяются не одним параметром типа напряжения V_g на затворе, а двумя: V_g и k_{\parallel}^2 . Зависимость $E_j(V_g)$ при $k_{\parallel} = 0$ будет аналогична зависимости на рис. 2 с аналогичной невозможностью получить самоогласованное решение в окрестности рождения новой подзоны.

Однако при фиксированном значении V_g и, следовательно, $U(z)$ своеобразное пороговое поведение будет иметь место в зависимости $E_j(k_{\parallel})$. Основная особенность этого случая в том, что минимально обнаружимое

при данном V_g значение положения дна j -той подзоны $E_{jm} = E_j(0)$ не равно нулю, а равно хоть и малой, но конечной отрицательной величине. Пороговое поведение в этом случае имеет место в зависимости $E_g(k_{\parallel})$ в окрестности дна.

При малых отрицательных значениях энергии E соответствующие волновые функции Ψ_E имеют большую пространственную протяженность за границей потенциальной ямы вглубь полупроводника. Это приводит к неустойчивому поведению процесса итеративного решения самосогласованной системы уравнений эффективной массы и Пуассона. Однако та же большая протяженность волновых функций из этой области малых энергий связи делает возможным анализ энергетического спектра методом теории порогового эффекта.

3.1. Уточнение пороговой теории в случае квазипотенциала в уравнении эффективной массы для непараболической зоны проводимости

Пусть минимум $E_m(0, k_{zm}^2)$ подзоны размерного квантования лежит близко к границе непрерывного спектра данной квазипотенциальной ямы $U_{qp}(z)$. Найдем зависимость энергии от квазиимпульса k_{\parallel} , параллельного поверхности. Для этого рассмотрим уравнение эффективной массы для непараболической зоны проводимости в двухзонном приближении (см. [4], уравнения (4.17), (4.39)) при двух значениях энергии E и условии $k_{zm}^2 < 0$.

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_c^*} \frac{d^2}{dz^2} + U_{qp}(z, E_m) \right] \Psi_{Em}(z) = k_{zm}^2 \Psi_{Em}(z), \quad (14)$$

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_c^*} \frac{d^2}{dz^2} + U_{qp}(z, E) \right] \Psi_E(z) = k_z^2 \Psi_E(z). \quad (15)$$

Здесь квазипотенциал определен формулой

$$U_{qp}(z, E) = U(z) \left(1 + 2 \frac{E}{E_g} \right) - \frac{U^2(z)}{E_g}. \quad (16)$$

Зависимость энергии от квантовых чисел $E(k_{\parallel}, k_z)$ дается корнями уравнения дисперсии

$$2m_c^* E \left(1 + \frac{E}{E_g} \right) = k_{\parallel}^2 + k_z^2, \quad (17)$$

отвечающим зоне проводимости

$$E_c = \frac{E_g}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{2(k_{\parallel}^2 + k_z^2)}{m_c^* E_g}} - 1 \right) \quad (18)$$

и валентной зоне

$$E_v = -\frac{E_g}{2} \left(\sqrt{1 + \frac{2(k_{\parallel}^2 + k_z^2)}{m_c^* E_g}} + 1 \right), \quad (19)$$

где E_g — ширина запрещенной зоны.

По предположению, асимптотическое поведение собственных функций на бесконечности определяется условием $\lim_{z \rightarrow \infty} U(z) = 0$, наложенным на электростатический потенциал. Соответственно в этой области имеем

$$\Psi_{E_m} = C_m \exp(-|k_{zm}|z), \quad \Psi_E(z) = C_E \exp(-|k_z|z). \quad (20)$$

Заметим, что квазипотенциал в формуле (16), зависит явно от энергии двумерного состояния из-за чего разность проекций уравнений (14) и (15) на соответствующие собственные вектора будет содержать разность энергий $E - E_m$ при неизменном электростатическом потенциале. При расчете непараболической двумерной подзоны как функции k_{\parallel}^2 энергия изменяется с изменением латерального квазиимпульса при постоянном внешнем поле. Поэтому после оценки интеграла перекрытия $\langle E_m | E \rangle$ с помощью явных выражений (20) для собственных функций получаем соотношение пороговой теории, в котором роль параметра, от которого зависит глубина потенциальной ямы, играет полная энергия двумерного состояния. Роль энергии связи играет квадрат нормальной к поверхности компоненты квазиимпульса. В результате получаем соотношение вида пороговой формулы между полной энергией E и энергией локализации нормальной к поверхности степени свободы

$$E - E_m = \frac{E_g}{2\tilde{I}} [|k_z| - |k_{zm}| + (|k_z|^2 - |k_{zm}|^2) \times (I^{qw}(z^*) - z^*)]. \quad (21)$$

Здесь все переменные обезразмерены на E_F^0 и k_F соответственно. Интеграл \tilde{I} есть матричный элемент электростатической потенциальной энергии

$$\tilde{I} = \left[\int_0^{\infty} \frac{\Psi_E(z)}{C_E(k_z)} U(z) \frac{\Psi_{E_m}(z)}{C_{E_m}(k_{zm})} dz \right], \quad (22)$$

через I^{qw} обозначен неполный интеграл перекрытия

$$I^{qw}(z^*) = \left| \int_0^{z^*} dz \frac{\Psi_E(z)\Psi_{E_m}(z)}{C_E(k_z)C_{E_m}(k_{zm})} \right|. \quad (23)$$

В целом уравнение (21) по структуре близко к (13). Основное отличие в появлении разности между энергией в минимуме и энергией состояния при конечном k_{\parallel} . Поэтому и в случае квазипотенциала можно ожидать существования области энергий, в которой выполняются условия пороговой теории для спектра $E_j(k_{\parallel})$.

3.2. Результаты численных экспериментов

На рис. 7 построен рассчитанный самосогласованно двумерный спектр электронов в потенциальной яме обогащенного слоя вблизи поверхности. К поверхности приложен притягивающий электроны потенциал, создающий загиб зон -435 meV . В этом расчете не удалось

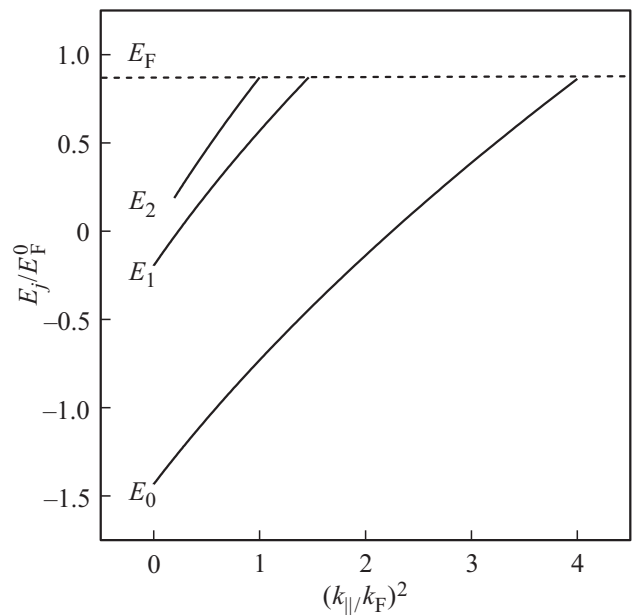


Рис. 7. Энергетический спектр квазидвумерных электронов обогащенного слоя на поверхности вырожденного полупроводника n -типа. Положение уровня Ферми ниже единицы отражает учет непараболичности спектра в объеме. Отметим, что в расчете не удалось получить спектр второй возбужденной подзоны E_2 , который начинался бы при $k_{\parallel} = 0$.

вычислить малую энергию связи минимума второй возбужденной подзоны. Возникающие при этом проблемы сходимости итерационной процедуры самосогласованного решения и нерегулярный способ ее обхода описаны в [4]. Здесь мы предприняли попытку разработать регулярный метод устранения известных трудностей численного расчета очень малых энергий связи, обусловленные большой протяженностью собственных функций таких состояний и ограниченностью интервала, на котором могут вестись реальные расчеты.

3.2.1. Стандартный алгоритм расчета

Для начала были проведены расчеты спектра при трех значениях потенциала поверхности, когда мелкой оказывается либо основная подзона E_0 , либо первая возбужденная E_1 , либо вторая E_2 . Все три спектра в координатах пороговых переменных показаны на рис. 8. Два графика $E_0(|k_z|)$ и $E_1(|k_z|)$ изменяются регулярным образом с углублением квазипотенциальной ямы и оба показывают пересечение оси абсцисс при $|k_z| > 0$. Это соответствует существованию отрицательной энергии минимума подзоны при $k_{\parallel} = 0$, так как в этом случае с большой точностью $E_m(0, k_z) = -|k_{zm}|^2$ (нормировка на E_F^0 и k_F).

Отметим, что реально в случае нормального вида зависимости $E_j(|k_z|)$ найти $|k_{zm}|$ из уравнения (21) несколько сложнее, чем в случае параболической зоны определить момент появления новой подзоны из

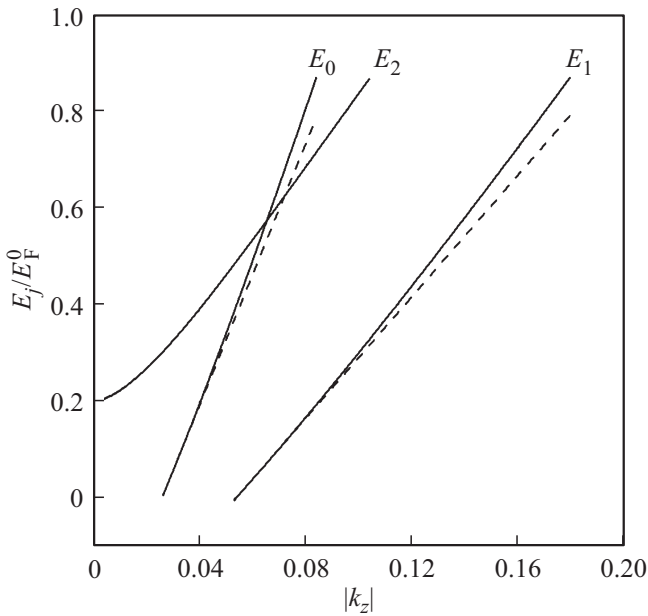


Рис. 8. Инвертированная зависимость энергии локализации $\sqrt{-k_z^2}$ от параметра квазипотенциала — энергии E двумерного состояния. Видно резкое отличие графика второй возбужденной подзоны E_2 от графиков для основной и первой возбужденной подзоны. Все три графика рассчитаны при разных значениях потенциала поверхности, подобранных так, чтобы соответствующий уровень был на границе обнаружения в наших расчетах. Заметим, что чем больше порядковый номер подзоны на этом рисунке, тем глубже соответствующая яма электростатического потенциала. Вдоль всех кривых электростатический потенциал не изменяется. Изменяется квазипотенциал в связи с изменениями энергии E .

пересечения прямой с осью ординат на рис. 4. Надо сначала положить $E_m = -|k_{zm}|^2$, затем найти коэффициенты при всех степенях квадратного трехчлена относительно $|k_{zm}|$, аппроксимировав вычисленный набор пар $(E_j, |k_z|)$ параболой. Найденные коэффициенты надо использовать при решении получающегося из (21) квадратного уравнения относительно $|k_{zm}|$, приняв, например, $E = 0$ и отыскав соответствующее значение $|k_z|$. После этого положить $E_m = -|k_{zm}|^2$ (нормировка на E_F^0 и k_F). Процедуру можно упростить, если есть достаточной протяженности линейный по $|k_z|$ участок. Однако относительно минимального значения $|k_{zm}|$ все равно надо будет решать квадратное уравнение.

3.2.2. Исследование аномальной пороговой зависимости второй возбужденной подзоны E_2

Для выяснения причин появления в результате расчета нефизической зависимости энергии от квазиимпульса типа графика E_2 , были проверены возможные математические причины неточного определения близкого к нулю собственного значения уравнения эффективной массы. Оценено влияние переноса нулевого граничного

условия на решение из бесконечности в конечную точку L , границу расчетного интервала. Это порождает в решении примесь растущей экспоненты в окрестности точки L , но при выбранных значениях L давало различия только в третьем-четвертом знаке и было отброшено.

Вторая возможная причина — нестандартный вид квазипотенциала, который состоит из двух слагаемых и только одно из них изменяется при изменении параметра E . Для проверки этой причины был проделан аналогичный расчет для трех случаев мелких подзон — основной, первой и второй возбужденной — в прямоугольной потенциальной яме. Квазипотенциал (16) такой ямы остается прямоугольной ямой, но уже состоит из двух слагаемых.

Результаты расчетов представлены на рис. 9. Видно, что в этом случае все три мелкие подзоны изменяются с глубиной потенциальной ямы систематическим образом. Соответствующие минимальные значения для потенциалов, при которых появляется каждая подзона, указаны в подписи к рисунку. Эти результаты показали, что для первых двух подзон пороговая теория вполне справедлива. Причина нестандартного поведения третьей оставалась неясной. Однако можно было предположить, что количество узлов в области квазипотенциальной ямы между точками поворота не является такой причиной, так как по этой характеристике собственные функции второй возбужденной подзоны одинаковы, что в квазипотенциальной яме электростатического потенциала, что прямоугольного.

Имелось еще одно место в программе расчета, которое могло порождать неясные последствия. Так как без

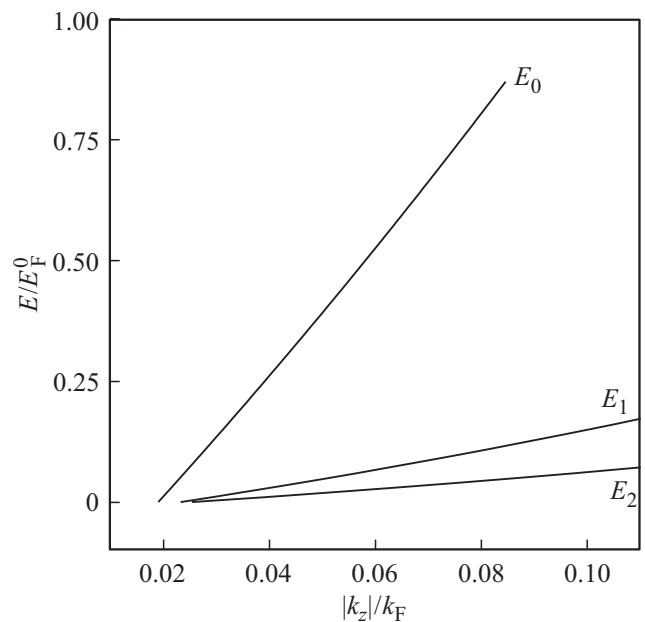


Рис. 9. Зависимость $E_j(|k_z|)$ для мелких подзон в случае прямоугольной квазипотенциальной ямы. Ширина затравочной потенциальной ямы 5.0, глубина $U_0 = -0.105$ (E_0), -0.795 (E_1), -1.89 (E_2). Нет аномального поведения.

учета вклада в плотность электронов от полного спектра подзоны E_2 на рис. 7 итеративное решение не сходилось с заданной точностью, то при вычислении этого вклада для участка спектра $0 \leq k_{\parallel} < k_{\parallel c}$ принудительно задавалась волновая функция, одинаковая для всех k_{\parallel} из соображений, что в этом диапазоне малых энергий связи все функции мало отличаются в области потенциальной ямы.

После исключения этой процедуры, итеративное решение, действительно, перестало сходиться в том смысле, что не достигался обычный критерий выхода из цикла самосогласования на уровне разности входа и выхода порядка $1 \cdot 10^{-5}$. Но не случилось и неограниченного нарастания ошибки самосогласования. Более того, оказалось, что в таком режиме стали регулярно чередоваться два типа возможных решений, представленных на рис. 10. Один, совсем нефизический, типа E_2 на рис. 8. Другой показывает более разумное, на первый взгляд, поведение в смысле естественного пересечения оси абсцисс при $|k_z| > 0$. Такая картина сохраняется и при продлении расчетов до числа циклов порядка 40. То есть появилось устойчивое состояние используемого алгоритма самосогласованного решения системы нелинейных уравнений.

Чтобы проверить, являются ли нормальными расположенные в правильной области параметров зависимости типа 18-ого или 20-ого циклов, на рис. 11 совместно представлены зависимости E_0 и E_1 из рис. 8 и зависимость $E_2^{(18)}$ из рис. 10. Из рисунка видно, что эти зависимости не принадлежат к одному семейству.

Оставалось выяснить, не является ли причиной странного поведения спектра третьей подзоны медленное спадание самосогласованного электростатического потенциала. В принципе, из теории экранирования поверхностного заряда известно, что на больших расстояниях от поверхности потенциал убывает как $1/z^2$. Такое медленное убывание является пограничным для возможности считать окрестность бесконечности областью, где можно использовать в качестве асимптотики решение для $U(z) \equiv 0$. Однако наличие модуляции потенциала фриделевскими осцилляциями оставляло возможность, что эти осцилляции порождают более быстрое эффективное убывание потенциала к нулю.

Ответ на этот вопрос могла дать оценка поправки к основной пороговой формуле, которая описывается членами в круглых скобках формулы (21). Для этого необходимо знать, когда начинается область экспоненциального поведения найденных численно решений и насколько хорошо она выражена. Хорошим индикатором области экспоненциальной зависимости решения может быть логарифмическая производная решения, которая в этой области выходит на константу, равную постоянной затухания (или роста).

С этой точки зрения удобной оказалась связь логарифмической производной с фазой $\phi(z)$, которая находится при реализации используемого нами метода тригоно-

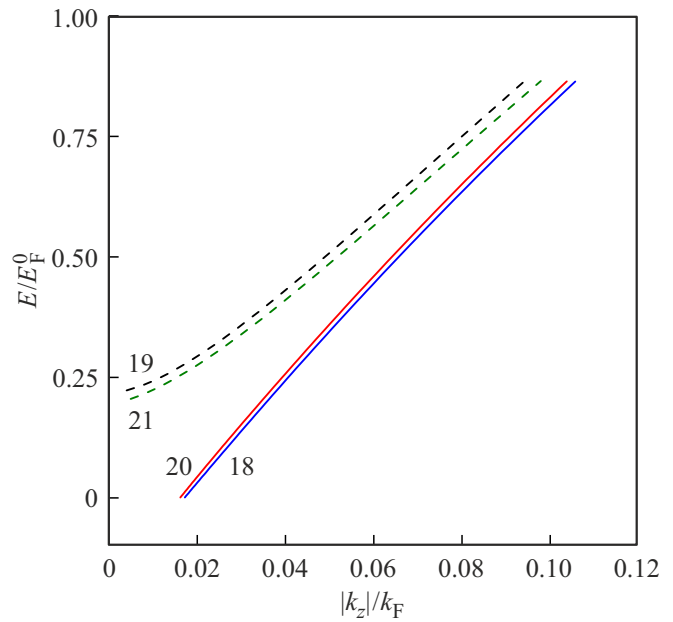


Рис. 10. Два типа решения самосогласованного итеративного алгоритма в случае мелкой второй возбужденной подзоны E_2 . Потенциал поверхности, отсчитанный от уровня Ферми, равен -445 meV. Числа около кривых обозначают номера циклов самосогласованной процедуры последовательного решения системы уравнение Пуассона — уравнение эффективной массы для непараболической зоны проводимости. Видно, что между кривыми одного типа различия малы, меньше, чем между кривыми разных типов. Однако и внутри одного типа сходимости с заданной точностью нет, есть колебания порядка различий между кривыми на рисунке.

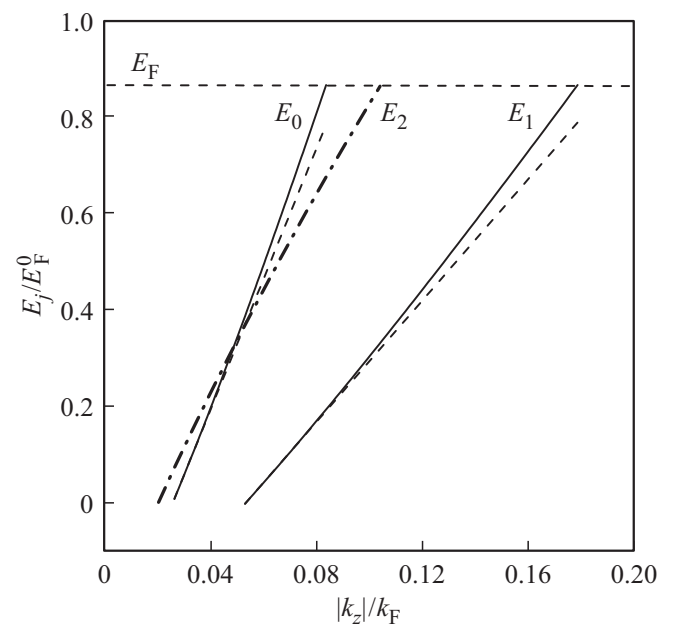


Рис. 11. Три пороговых зависимости для мелких подзон основного, первого и второго возбужденных состояний, взятые из рис. 8 (E_0 и E_1) и рис. 10 ($E_2^{(18)}$). Нет никакого сходства между поведением первых двух зависимостей и третьей при углублении квазипотенциальной ямы.

Таблица 2. Таблица параметров и результатов $E_F^0 = 71.46 \text{ meV}$

Номер подзоны	Параметры			Результаты			
	F_s kV/cm	U_s meV	E/E_F	$ k_z /k_F$	Точка поворота z_t	z^*	$I^{qw}(z^*)$
E_0	-5	-18.6	0.00	0.026	13.44	62.0	0.925
			0.18	0.039	11.72	60.9	0.992
E_1	136	-160.0	0.00	0.053	12.08	51.7	0.994
			0.25	0.093	10.51	49.5	0.999
$E_2^{(18)}$	471	-382.6	$-2.7 \cdot 10^{-4}$	0.017	25.97	61.54	0.812
			0.25	0.042	20.36	61.2	0.987

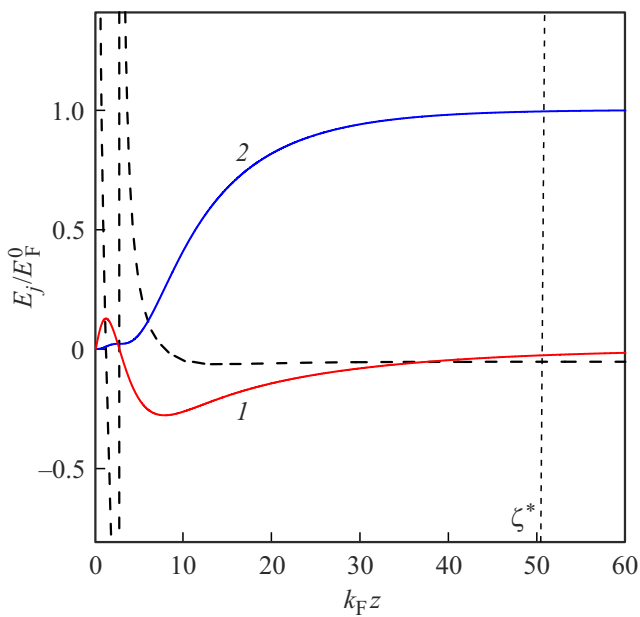


Рис. 12. Кривая 1 — волновая функция состояния с $E = 0$ первой возбужденной подзоны E_1 . Кривая 2 — зависимость интеграла от квадрата этой волновой функции как функция верхнего предела. Штриховая кривая — пространственная зависимость тангенса фазы от координаты z . Вертикальная штриховая линия отмечает положение точки z^* . Потенциальная яма создана полем 136 kV/cm.

метрической прогонки, в виде $\psi'(z)/\psi(z) = \text{tg}(\phi(z))$. На рис. 12 для состояния $E = 0$ мелкой подзоны E_1 построены графики волновой функции, тангенса фазы и нормировочного интеграла как функции верхнего предела. Границей квазипотенциальной ямы принята точка z^* , в которой тангенс становился равным известному значению постоянной затухания $-|k_z|$ с точностью три знака.

Видно, что одновременно к точке z^* нормировочный интеграл практически достиг своего предельного значения единицы. Как и полагается, волновая функция первого возбужденного состояния имеет один ноль внутри ямы между точками поворота для данной энергии связи $-|k_z|^2$.

Для удобства сравнения между собой кривых, рассчитанных при разных параметрах, их характеристики были сведены в табл. 2. Данные были взяты из рассчитанных волновых функций для двух характерных точек на графиках всех подзон: при $E = 0$, т.е. вблизи дна подзоны, и на верхней границе прямолинейного участка, который использовался для уточнения энергии в минимуме подзоны. Хотя последняя процедура не улучшила результаты, полученные с большей длиной $L = 350$ расчетного интервала и, соответственно, заметно больших затрат времени счета.

Анализ таблицы показал, что данные E_2 указывают прежде всего на увеличение ширины потенциальной ямы с ростом ее глубины вследствие увеличения поля на поверхности. Тогда как при переходе от поля, при котором основная подзона E_0 мелкая, к большему полю, когда мелкой становится первая возбужденная подзона E_1 , яма сужалась вследствие увеличения плотности поверхностного заряда квазидвумерных электронов с увеличением глубины ямы.

Обратно, если при увеличении поля яма стала уширяться, значит расчет дал недостаточную избыточную плотность электронов в состояниях двумерного спектра вблизи поверхности. Этот недостаток электронов компенсируется заложенным в алгоритме механизмом изменения распределения электронов в объеме, который обеспечивает обращение в ноль электрического поля на бесконечности и приводит в этом случае к плавному уширению потенциальной ямы.

Важно подчеркнуть, что в рассматриваемом случае n -InAs для появления в спектре второй возбужденной подзоны к поверхности надо приложить такое поле, при котором загиб зон на поверхности почти сравнивается с шириной запрещенной зоны. Это позволяет предположить, что ответ на вопрос, где могут находиться недостающие электроны в поверхностных состояниях, надо искать в возможном формировании двумерных валентных поверхностных подзон.

При столь сильном загибе зон внешним полем, что минимум квазипотенциала может оказаться ниже потолка валентной зоны, уравнение эффективной массы (17) в двухзонной модели Кэйна может иметь решения с

энергией E в запрещенной зоне ниже ее середины $-E_g < E < -E_g/2$. Эти состояния следует искать в виде разложения по базису из функций Блоха валентной зоны с законом дисперсии в виде второго корня $E_v(k^2)$ (19) дисперсионного уравнения. Так как начальная энергия этих состояний находится в запрещенной зоне выше потолка валентной зоны, в нелегированном полупроводнике они не заполнены валентными электронами. Но в случае легирования зоны проводимости, электроны оттуда могут переходить на свободные состояния двумерной валентной зоны и образовывать недостающий поверхностный заряд.

Таким образом, механизм появления двух типов зависимости $E_2(|k_z|)$ можно представить следующим образом. Так как в расчете не учитывалась возможность образования двумерных валентных подзон, заполненных электронами, то при решении нелинейного уравнения Пуассона (2) (уточнение для непараболического зонного спектра см. раздел 4.1.3 в [4]) недостаток плотности квазидвумерных электронов компенсировался образованием самосогласованной широкой потенциальной ямы, форма которой отлична от регулярной формы ямы, образующейся при последовательном увеличении поверхностного поля.

В уширенной яме на следующем цикле самосогласования определяется мелкая подзона из состояний зоны проводимости, которая заполняется электронами. Как следствие, яма сужается, и состояния второй возбужденной подзоны при $k_{||} = 0$ и ближайшей окрестности становятся настолько мелкими, что не проявляются, пока углубление квазипотенциальной ямы из-за роста $E \approx k_{||}^2$ не делает энергию уровня $k_z^2(k_{||}^2)$ больше порога обнаружения ($\simeq -1.5 \cdot 10^{-4} E_F^0$ в нашем случае). Это приводит к двумерному спектру с подзоной E_2 типа показанного на рис. 7. Соответственно, при интегрировании по спектру отсутствует вклад состояний E_2 в области $0 < k_{||} < k_{||c}$ и возникает опять недостаток плотности заряда электронов в двумерных состояниях. Это снова вызывает уширение самосогласованной ямы, в которой получается вычислить весь спектр второй возбужденной подзоны, но квазипотенциальная яма имеет другую форму.

3.3. Выводы

В виду многоплановости полученных в этом разделе результатов имеет смысл отдельно обсудить их следствия.

3.3.1. О гипотезе существования двумерных спектров, начинающихся от $k_{||c} \neq 0$

Высказанное в статье [2] предположение о возможном существовании в двумерном спектре полупроводника с непараболической зоной проводимости подзоны $E_j(k_{||})$, которая начинается от ненулевого значения латерального квазиимпульса $k_{||c} \neq 0$, основывается на двух фактах.

Первый — особое поведение спектральных кривых (fig. 2 в [2]), рассчитанных с учетом экранирования внешнего поля не только электронами в двумерных состояниях, но и объемными. Второй — характерная картина зависимости от напряжения затвора V_g числа электронов в первой возбужденной подзоне на начальном этапе ее появления (см. вставку на fig. 3 в [2]). Эта зависимость была измерена в работе [19] и четко соответствует пороговой зависимости, представленной на рис. 3. Следовательно, факт экспериментального свидетельства в пользу обсуждаемого предположения из рассмотрения можно исключить.

Что касается модельного спектра возбужденной подзоны на fig. 2 в [2], то он качественно похож на график подзоны E_2 на рис. 7 — также начинается при $k_{||c} \neq 0$ и начальная энергия приходится на область непрерывного спектра. Однако в случае нашего расчета анализ характеристик графика E_2 по данным, представленным в табл. 2, показывает, что здесь имело место связанное состояние совсем в другой квазипотенциальной яме. Гораздо более широкой, если сравнивать значения точек поворота с положением точек поворота для обычных подзон E_0 и E_1 , и медленнее стремящейся к нулю на бесконечности. Возможные причины появления такой широкой потенциальной ямы при недостатке квазидвумерных электронов для экранирования внешнего поля пояснены в разделе 3.2.2. В свою очередь, в широкой потенциальной яме может появиться очень мелкий уровень, энергия связи которого за пределами разрешения конкретной реализации алгоритма, как это пояснялось в [4] (Приложение А.1).

Таким образом, экспериментального подтверждения существования размерно-квантованных подзон $E_j(k_{||})$ с $k_{||min} \neq 0$ нет. Что касается возможности появления такого типа спектра в вычислениях для непараболической зоны проводимости, то в нашем случае, он, во-первых, появляется при загибах зон, сравнимых с E_g , когда надо ставить вопрос о возможном влиянии на результат двумерных подзон, отвечающих валентной зоне.

Во-вторых, следует иметь в виду, что при очень малых энергиях связи и энергии E вблизи границы непрерывного спектра, энергия размерно-квантованного уровня k_z^2 оказывается очень медленно меняющейся функцией $k_{||}$. А именно, если в уравнении (21) положить $E_m = k_{zm} = 0$ и учесть, что вблизи границы с непрерывным спектром и малой энергии связи $E \simeq k_{||}^2$, то получим $k_z^2 \sim k_{||}^4$. Этот факт означает, что с ростом $k_{||}$ энергия уровня будет медленно выходить из зоны необнаружения. При этом полная энергия уровня будет расти, т.к. $E = k_{||}^2$, и достигнет значений из области непрерывного спектра к моменту проявления в расчете конечного значения энергии связи. Что и видно на рис. 7.

Нельзя также считать доказательством представленные в работе [20] результаты расчета двумерного спектра электронов в обогащенном слое на поверхности n -InAs. Для такого тонкого вопроса они получены

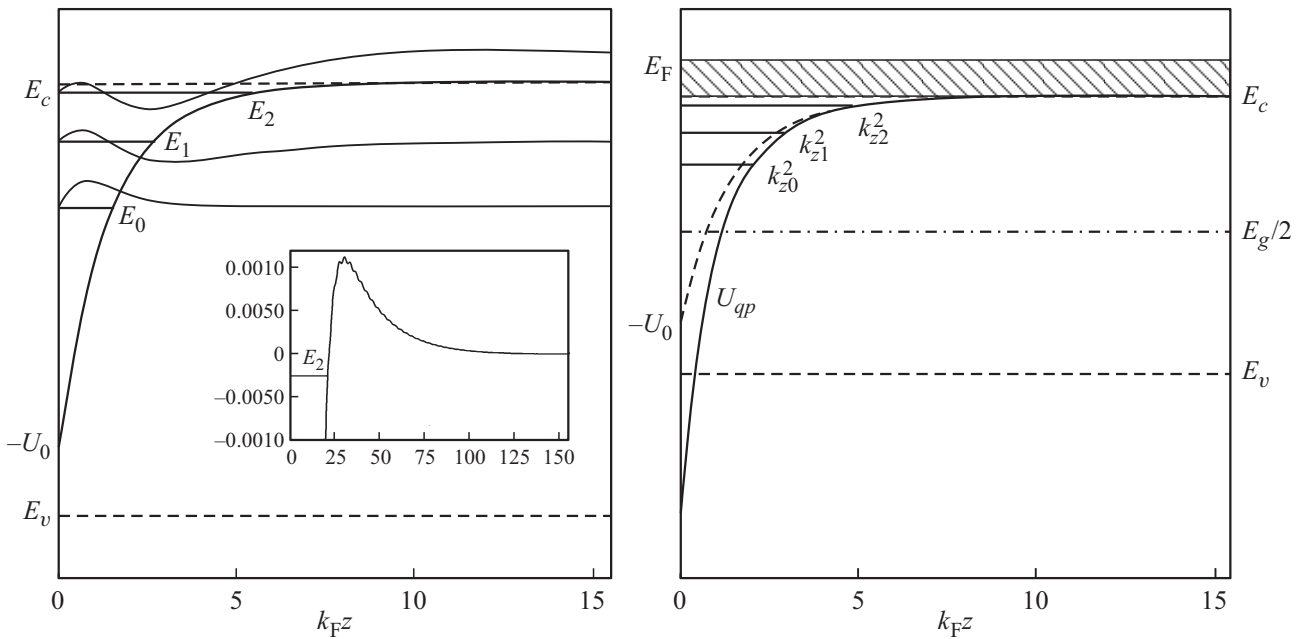


Рис. 13. Левая панель. Энергетическая схема обогащенного слоя для случая потенциала поверхности, когда появляется вторая возбужденная подзона E_2 . Показаны график потенциальной энергии, положения минимумов подзон (E_2 — схематически из-за близости к нулю шкалы энергий, см. табл. 2, и волновые функции соответствующих состояний. На вставке показано положение минимальной энергии подзоны E_2 относительно хода потенциальной энергии вблизи точки поворота z_{ij} . Отметим отсутствие в этом масштабе заметных фриделевских осцилляций. Правая панель. Положение относительно краев запрещенной зоны квазипотенциала, порожденного потенциалом на левом рисунке, для энергии минимума подзоны E_2 . Отмечены положения минимумов каждой подзоны (k_{z2}^2 опять схематически). Штриховая кривая — потенциальная энергия с левой панели. Заштрихованная полоса выше дна зоны проводимости — заполненные состояния непрерывного спектра.

при слишком короткой длине расчетного интервала ($k_F z_{\max} = 16$), с использованием в процессе самосогласования приближенного итеративного метода (mixing scheme [21]), который может обеспечить небольшую разницу между входом и выходом итеративной схемы, но не дает никакой информации о степени близости к реальному решению (см. обсуждение в [22]).

3.3.2. Роль состояний валентной зоны в двумерном спектре обогащенного слоя

В работе Келдыша [23] о глубоких уровнях в полупроводниках было отмечено, что наличие члена $-U^2/E_g$ в уравнении эффективной массы (15) означает притяжение этим потенциалом носителей любого знака. На этот факт было указано как на возможное объяснение образования некоторыми примесями глубоко в запрещенной зоне состояний дискретного спектра как для электронов, так и для дырок. Такое объяснение известного амфотерного поведения примесей с глубокими уровнями было увязано именно с их расположением вблизи середины запрещенной зоны. Поэтому желательно понять, пока хотя бы в принципе, возможно ли образование двумерных валентных подзон в глубокой потенциальной яме для электронов.

Графики потенциала U и квазипотенциала U_{qp} на рис. 13 показывают, что формально уравнение Шредингера

с таким потенциалом (на самом деле — уравнение эффективной массы (15) с таким квазипотенциалом) казалось бы могло иметь уровни дискретного спектра в области энергий ниже середины запрещенной зоны. Однако энергия состояний, сформированных из функций Блоха зоны проводимости с законом дисперсии (18), не может быть меньше $-E_g/2$. Причем это значение достигается минимумом подзоны при $k_{\parallel} = 0$ и энергии уровня $k_z^2/2m^* = -E_g/4$. Более отрицательные значения энергии уровня невозможны, так как при этом подкоренное выражение станет отрицательным, в энергии появится мнимая компонента, и такое состояние не может быть стационарным.

Таким образом, состояния с энергией из нижней половины запрещенной зоны могут быть сформированы только из функций Блоха валентной зоны, когда связь между энергией E и компонентами квазиимпульса (k_{\parallel}, k_z) будет определяться вторым корнем E_v (19) дисперсионного уравнения (17). Такое уравнение эффективной массы для непараболической валентной зоны в рамках двухзонной модели Кэйна может быть получено из системы уравнений (4.13) работы [4] точно тем же способом, что и уравнение эффективной массы для зоны проводимости (15). С точностью до малых по условию плавности поправок, пропорциональных производным потенциала $\partial U/\partial z$ разного порядка, это уравнение будет

иметь такой же вид, как (15). Только его собственные значения E должны принадлежать участку спектра $E < -E_g/2$ в силу упомянутых уже ограничений на подкоренное выражение.

Однако это уравнение обладает тем недостатком, что сопоставляет состоянию $|E\rangle$ отрицательную кинетическую энергию. Так как все стандартные уравнения математической физики описывают динамику частиц с положительной кинетической энергией, то непосредственное применение такого уравнения эффективной массы будет давать решения, осциллирующие в подбарьерной области и затухающие в надбарьерной. Искать в таком виде волновые функции состояний дискретного спектра невозможно.

В качестве решения этой проблемы можно перейти к собственным функциям и спектру задачи, обращенной во времени. В нашем случае, в силу вещественности исходного в теории Кэйна одночастичного гамильтониана и собственных функций задачи о полупространстве, дело сведется только к смене знака у собственного значения $E' = -E$ и у корней дисперсионного уравнения. Если перенумеровать их в порядке расположения по энергии сверху вниз, то $E'_1(k^2) = -E_v(k^2)$, $E'_2(k^2) = -E_c(k^2)$. Ноль шкалы энергий попрежнему определяется условием обращения в ноль электростатического потенциала на бесконечности, и ему отвечает граница непрерывного спектра прежней зоны проводимости, которая займет в этом представлении место валентной зоны. Валентная зона переместится на место зоны проводимости с верхней границей запрещенной зоны при $E' = E_g$. Решение уравнения Пуассона и электростатическая энергия при этом не изменяются.

Фактически при таком преобразовании дело сведется к замене $E \rightarrow -E'$ в квазипотенциале и поиску дискретных собственных значений в диапазоне $E_g/2 < E' < E_g$. Видно, что при таком преобразовании линейный по U член в уравнении эффективной массы из притягивающего к поверхности становится отталкивающим. Но квадратичный по U член может создавать, тем не менее, потенциальную яму и в этом случае. Тем самым, можно надеяться, вопрос о существовании двумерных валентных подзон в обогащенном слое на поверхности полупроводника n -типа из принципиального становится вопросом численных соотношений между параметрами. В согласии с замечанием Келдыша.

Если двумерные подзоны с положительной эффективной массой будут найдены, при обратном переходе в исходное пространство найденный спектр надо будет умножить на -1 . Полученные состояния валентного типа в запрещенной зоне должны быть заполнены электронами и давать вклад в полную плотность квазидвумерных электронов в обогащенном слое, так как лежат ниже уровня Ферми, расположенного в зоне проводимости. Заметим, что транспорт по таким подзонам вдоль поверхности должен быть дырочного типа из-за отрицательной динамической массы $1/m_v^* = (\partial E_v / \partial k_{\parallel}) / k_{\parallel}$.

В качестве возможного экспериментального свидетельства в пользу существования двумерных валентных подзон в потенциальной яме для электронов можно рассмотреть зависимости от напряжения затвора V_g заполнения подзон в обогащенном слое и инверсионном канале на поверхности кремния в MOSFET структуре (см. fig. 1 и fig. 3 в статье [24]). В обоих случаях ясно виден пороговый характер роста числа электронов во вновь появившейся подзоне с ростом напряжения на затворе. Однако в случае обогащенного слоя пороговый характер углубления подзоны после пересечения границы с непрерывным спектром выглядит естественным. Пороговое поведение в инверсионном канале, если считать, что он образован двумерной подзоной проводимости, не может быть объяснено. Так как такая подзона давно бы оторвалась от границы непрерывного спектра зоны проводимости прежде, чем достигнуть потолка валентной зоны. С другой стороны, пороговое заполнение электронами только что образовавшейся в запрещенной зоне валентной подзоны вполне ожидаемо.

4. Заключение

Проведенное исследование показало возможность использовать формулы пороговой теории для оценки мелких связанных состояний, даже если они не являются основными в данной потенциальной яме, а возбужденными и не отвечают общепринятым условиям существования пороговых явлений. Получены поправки к пороговым формулам, которые расширяют область применимости основных соотношений. Выявлены признаки возможного существования двумерных валентных подзон в энергетическом спектре обогащенного слоя на поверхности полупроводника n -типа.

Полученные здесь результаты не подтвердили гипотезу о существовании „кинематически связанных“ состояний, предложенную в [2] и поддержанную в [9]. Появление этой гипотезы связано с попыткой объяснить наблюдаемый пороговый характер зависимости энергий подзон от потенциала затвора. Материал данной работы показывает, что пороговое поведение возникает без предположения о существовании двумерных подзон, спектр которых начинается с $k_{\parallel} \neq 0$.

Наконец, отметим, что анализ порогового поведения может иметь не только чисто практический характер, как метод более точного определения момента появления новой подзоны, но и служить средством исследования ее принадлежности к зоне проводимости или к валентной зоне.

Список литературы

- [1] В.Ф. Раданцев, Т.И. Дерябина, Л.П. Зверев, Г.И. Кулаев, С.С. Хомутова. ЖЭТФ **91**, 1029 (1986).
- [2] R.E. Doezema, H.D. Drew Phys. Rev. Lett. **57**, 762 (1986).

- [3] А.И. Базь, Я.Б. Зельдович, А.М. Переломов. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. 2 изд. Наука, М. (1971).
- [4] А.Я. Шульман, Д.В. Посвянский. *ЖЭТФ* **157**, 6, 1072 (2020).
- [5] Д.В. Посвянский, А.Я. Шульман. *ЖЭТФ* **136**, 1, 169 (2009).
- [6] Ю.Л. Балкарей, В.Б. Сандрмирский. *ЖЭТФ* **54**, 3, 808 (1968).
- [7] V.F. Radantsev, V.V. Kruzhaev. *Int. J. Nanosci.* **06**, 301 (2007).
- [8] Kyoung-Youm Kim, ByoungHo Lee. *IEEE J. Quantum Electron.* **37**, 546 (2001).
- [9] M. Kubisa, W. Zawadzki. Kinetic confinement of electrons in modulated semiconductor structures. In: *From Quantum Mechanics to Technology. Lecture Notes in Physics.* Z. Petru, J. Przystawa, K. Rapcewicz. /EDS V. 477. Springer, Berlin (1996).
- [10] В.М. Галицкий, В.М. Карнаков, В.И. Коган. Задачи по квантовой механике. 2-е изд. Наука, М. (1992). 880 с.
- [11] H. Bethe, R. Peierls. *Proc. Royal Soc. A* **148**, 146 (1935).
- [12] E.P. Wigner. *Phys. Rev.* **73**, 1002 (1948).
- [13] А.Я. Шульман, Д.В. Посвянский. Тезисы XIV Рос конф. по физике полупроводников. Новосибирск (2019). 253 с.
- [14] В.В. Степанов. Курс дифференциальных уравнений. 8-е изд. ГИФМЛ, М. (1959). Гл. VI, § 2.4.
- [15] А.Я. Шульман. Функциональный подход к бесконечным системам с неоднородным электронным газом. Математический аппарат. In preparation.
- [16] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика.* Наука, М. (1989). 768 с.
- [17] О.В. Константинов, А.Я. Шик. *ЖЭТФ* **58**, 5, 1662 (1970).
- [18] А.Я. Шульман. Уравнение эффективной массы для полупроводника с непараболической зоной проводимости. Тезисы XXIV Уральской междунар. зимней шк. по физике полупроводников. Екатеринбург (2022). С. 145.
- [19] H. Reisinger, H. Schaber, R.E. Doezema. *Phys. Rev.* **B 24**, 5690 (1981).
- [20] A. Zhang, J. Slinkman, R.E. Doezema. *Phys. Rev.* **B 44**, 10752 (1991).
- [21] F. Stern. *J. Computat. Phys.* **6**, 56 (1970).
- [22] A.Ya. Shul'man. *J. Phys.: Conf. Ser.* **35**, 163 (2006).
- [23] Л.В. Келдыш. *ЖЭТФ* **45**, 2, 364 (1963).
- [24] G.M. Gusev, Z.D. Kvon, V.N. Ovsyuk. *Solid State Commun.* **49**, 9, 899 (1984).

Редактор Т.Н. Василевская