Письма в ЖЭТФ, том 75, вып. 9, с. 570 – 572 © 2002 г. 10 мая

Инвариант задачи о размерном квантовании в самосогласованном потенциале около границы полупроводника

С. И. Дорожкин

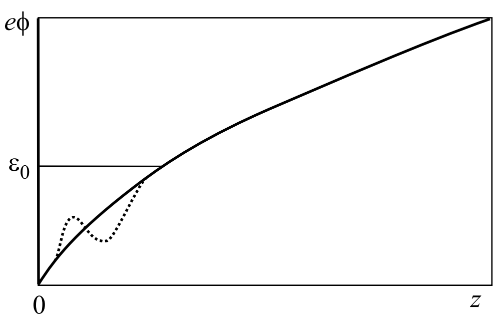
Институт физики твердого тела РАН, 142432 Черноголовка, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 2 апреля 2002 г.

Найден инвариант задачи на собственные значения одномерного нелинейного интегро-дифференциального оператора, действующего на нормированные собственные функции. Инвариантность полученного соотношения состоит, в частности, в его независимости от детального вида оператора. Рассмотренная задача возникает в физике двумерных электронных систем, создаваемых около границы полупроводника, где потенциальная яма формируется, с одной стороны, высоким потенциальным барьером на границе, а с другой стороны, встроенным в полупроводник электрическим полем, экранирующимся квазидвумерными электронами, заполняющими яму. Полученный инвариант отражает связь между энергией уровня размерного квантования и средним размером волновой функции электрона в яме.

PACS: 72.20.Fr, 72.20.My, 73.40.Kp

Анализируемая в данной работе задача уже более тридцати лет (см. обзор [1]) активно решается численно при расчете уровней энергии и волновых функций электронов в одномерных потенциальных ямах около плоских границ раздела между полупроводником и диэлектриком, а также между двумя полупроводниками с различными энергетическими щелями. В рассматриваемом здесь случае эта граница соответствует бесконечно высокому скачку потенциала при значении координаты z, перпендикулярной границе, $z = 0$ (см. рисунок). Электроны



Схематическая зависимость потенциальной энергии электрона $e\phi$ ($e < 0$) от координаты z, перпендикулярной поверхности полупроводника. Сплошная и штриховая линии соответствуют различным функциям $f(z)$, для которых выполняется соотношение (3)

с зарядом e и эффективной массой m прижимаются к границе внешним электрическим полем E_0, создаваемом зарядами, находящимися в полупространстве $z < 0$. Все заряды считаются равномерно распределенными вдоль плоскостей, параллельных границе полупроводника. В типичных случаях возникающая потенциальная яма узка, так что квантование движения электрона вдоль оси z приводит к появлению дискретных уровней размерного квантования (являющихся доньями подзон, соответствующих свободному движению электронов вдоль поверхности полупроводника). Экранировка электрического поля электронами с поверхностной плотностью n_s делает задачу нелинейной. Базовое для этой задачи уравнение при $z \geq 0$ может быть записано в следующем виде [1]:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi_0(z)}{dz^2} + \Psi_0(z)e\left[-E_0\, z + \frac{2\pi e n_s}{\chi}z + \right.$$
$$\left. + \frac{4\pi e n_s}{\chi}\int\limits_0^z \left(\Psi_0(u)\right)^2\, (u-z)\, du + f(z)\right] = \varepsilon_0\, \Psi_0(z). \quad (1)$$

Здесь ε_0 – энергия нижнего уровня, χ – диэлектрическая проницаемость полупроводника, $f(z)$ – потенциал, создаваемый связанными зарядами, находящимися в области $z > 0$, и не зависящий от E_0 и n_s. Другие ограничения на этот потенциал будут обсуждены ниже. Собственная функция задачи $\Psi_0(z)$ удовлетворяет граничным условиям $\Psi_0(z=0) = \Psi_0(z = \infty) = 0$ и является нормированной:

$$\int\limits_0^\infty \left(\Psi_0(z)\right)^2\, dz = 1. \quad (2)$$

Основное содержание этой работы состоит в том, чтобы показать, что для решений задачи (1), (2) выполняется следующее соотношение:

$$\frac{\partial \varepsilon_0}{\partial E_0} + e z_0 - \frac{2\pi e^2 n_s}{\chi}\frac{\partial z_0}{\partial E_0} + e n_s \frac{\partial z_0}{\partial n_s} = 0, \tag{3}$$

где

$$z_0 = \int\limits_0^\infty (\Psi_0(z))^2 \, z \, dz \tag{4}$$

есть среднее значение координаты z в состоянии с волновой функцией $\Psi_0(z)$.

Доказательство соотношения (3) проводится путем вычисления входящих в него частных производных и подстановки полученных выражений в формулу (3). Производные вычисляются путем линеаризации уравнения (1) по приращениям параметров ΔE_0, Δn_s и $\Delta\varepsilon_0$, а также по вариации $\Delta\Psi_0(z)$ функции $\Psi_0(z)$. Аналогично обычной теории возмущений вариация $\Delta\Psi_0(z)$ разлагается по ортонормированной системе собственных функций $\Phi_i(z)$ (i – целое), которые в рассматриваемом случае нелинейного уравнения (1) выбираются удовлетворяющими уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Phi_i(z)}{dz^2} + \Phi_i(z) e \left[-E_0 z + \frac{2\pi e n_s}{\chi} z + \right.$$
$$\left. + \frac{4\pi e n_s}{\chi} \int\limits_0^z (\Psi_0(u))^2 (u - z)\, du + f(z) \right] = \lambda_i \Phi_i(z). \tag{5}$$

Это обычное уравнение Шредингера с заданным потенциалом. Для приводимого ниже доказательства достаточно потребовать, чтобы все собственные значения λ_i задачи (5) образовывали дискретный спектр, что накладывает ограничения на возможный вид функции $f(z)$. Весьма вероятно, однако, что для выполнения основного для данной работы соотношения (3) ограничения на функцию $f(z)$ могут быть и более слабыми. Отметим, что функция $\Psi_0(z) = \Phi_0(z)$ также входит в выбранную систему ортонормированных функций $\Phi_i(z)$. В силу условия нормировки (2) вариация $\Delta\Psi_0(z)$ ортогональна $\Psi_0(z)$, так что

$$\Delta\Psi_0(z) = \sum_{i\neq 0} \alpha_i \, \Phi_i(z). \tag{6}$$

Здесь α_i – коэффициенты разложения. Путем умножения уравнения, полученного линеаризацией уравнения (1) и подстановкой выражения (6) для $\Delta\Psi_0(z)$, на функции $\Phi_k(z)$ ($k \neq 0$) и $\Psi_0(z)$ с последующим интегрированием по z задача сводится соответственно к неоднородной системе линейных уравнений относительно параметров α_i и выражению для $\Delta\varepsilon_0$. Для случаев вычисления производных по E_0 и n_s соответствующие системы уравнений имеют следующий вид:

$$\sum_{i\neq 0} b_{ki}\, \alpha_i^{(E_0)} = e\, \Delta E_0 \, B_k, \tag{7}$$

$$\sum_{i\neq 0} b_{ki}\, \alpha_i^{(n_s)} = -\frac{2\pi e^2}{\chi}\Delta n_s \,(B_k + 2A_k). \tag{8}$$

Здесь

$$b_{ki} = \delta_{ki}\,(\lambda_k - \varepsilon_0) + \frac{8\pi e^2 n_s}{\chi}\int\limits_0^\infty \Psi_0(z)\Phi_k(z) \times$$
$$\times \int\limits_0^z \Psi_0(u)\,\Phi_i(u)\,(u - z)\, du\, dz, \tag{9}$$

$$A_k = \int\limits_0^\infty \Psi_0(z)\Phi_k(z)\int\limits_0^z (\Psi_0(u))^2\,(u - z)\, du\, dz, \tag{10}$$

$$B_k = \int\limits_0^\infty \Psi_0(z)\Phi_k(z)\, z\, dz. \tag{11}$$

При доказательстве соотношения (3) существенно используются равенства $b_{ik} = b_{ki}$ и

$$\int\limits_0^\infty (\Psi_0(z))^2 \int\limits_0^z \Psi_0(u)\Phi_k(u)\,(u - z)\, du\, dz = A_k + B_k, \tag{12}$$

которые легко проверяются перестановкой порядка интегрирования в соответствующих двойных интегралах. Для доказательства (3), оказывается, нет необходимости получать детальные выражения для решений систем линейных уравнений (7) и (8), а достаточно записать эти решения в довольно общем виде:

$$\alpha_i^{(E_0)} = e\,\Delta E_0 \sum_{k\neq 0} c_{ik} B_k, \tag{13}$$

$$\alpha_i^{(n_s)} = -\frac{2\pi e^2}{\chi}\Delta n_s \sum_{k\neq 0} c_{ik}(B_k + 2A_k) \tag{14}$$

и воспользоваться симметричностью коэффициентов c_{ik} ($c_{ik} = c_{ki}$), следующей из симметричности коэффициентов b_{ik}. Справедливость соотношения (3) проверяется подстановкой в него следующих выражений для частных производных, полученных с учетом формулы (12) в соответствии с описанной выше схемой:

$$\frac{\partial \varepsilon_0}{\partial E_0} = -e z_0 + \frac{8\pi e^3 n_s}{\chi}\sum_{i,k\neq 0} c_{ik}\, B_k (A_i + B_i), \tag{15}$$

$$\frac{\partial z_0}{\partial E_0} = 2\int\limits_0^\infty \Psi_0(z)\frac{\Delta\Psi_0(z)}{\Delta E_0} z\, dz = 2e \sum_{i,k\neq 0} c_{ik}\, B_k B_i, \tag{16}$$

$$\frac{\partial z_0}{\partial n_s} = -\frac{4\pi e^2}{\chi}\sum_{i,k\neq 0} c_{ik}\,(B_k + 2A_k) B_i. \tag{17}$$

При проверке необходимо учесть симметричность коэффициентов c_{ik}.

С математической точки зрения, инвариантность выражения (3) состоит прежде всего в том, что оно не зависит от вида функции $f(z)$ (пока эта функция удовлетворяет обсуждавшимся выше условиям) и параметра m. Кроме того, это выражение остается справедливым для всех решений задачи (1), (2), а не только соответствующего наименьшему ε_0 из набора собственных значений уравнения (1). Последнее из этих утверждений очевидно из того факта, что при доказательстве на значение ε_0 не накладывалось никаких ограничений.

Весьма вероятно, что полученное соотношение отражает важную симметрию, существующую в рассматриваемой задаче. На это указывает, в частности, такой довольно легко проверяемый факт, что условие (3) выполняется не только для функций, являющихся решением задачи (1), (2), но также для любой нормированной однопараметрической функции, значение параметра в которой выбрано таким образом, чтобы минимизовать функционал, минимизация которого в общем случае приводит к уравнению (1). В этом случае величина ε_0 представляет собой среднее значение энергии электрона (кинетической и потенциальной) в потенциале, входящем в уравнение (1), для состояния, описываемого выбранной однопараметрической функцией.

Физический смысл соотношения (3) очевиден: оно связывает размер области локализации волновой функции электрона в потенциальной яме z_0 и энергию уровня размерного квантования. Отметим, что, если положить в соотношении (3) $n_s = 0$, то будет получено соотношение, хорошо известное [1] для треугольной потенциальной ямы, которая возникает в задаче (1) при $f(z) = 0$. Более того, для треугольной ямы полученное соотношение верно для всех уровней энергии. Особенность физической задачи при $n_s \neq 0$ состоит в том, при заполнении электронами более высоких подзон размерного квантования исходное уравнение (1) должно быть заменено системой уравнений на волновые функции электронов в различных подзонах. Так что при $n_s \neq 0$ условие (3) выполняется при заполнении электронами лишь нижней подзоны размерного квантования, дно которой имеет энергию ε_0.

В качестве иллюстрации к сделанному выше общему утверждению об однопараметрических функциях легко проверить, что соотношение (3) выполняется, в частности, для вариационной волновой функции Фэнга–Ховарда $\xi(z) = (b^3/2)^{1/2} z \exp(-bz/2)$, которая довольно широко применяется для анализа квазидвумерных электронных систем около поверхности полупроводника [1]. Для такой функции $z_0 = 3/b$, а для энергии дна подзоны ε_0 может быть использовано приведенное в [1] выражение $\varepsilon_0 = \hbar^2 b^2/8m + 12\pi e^2 N_{\mathrm{depl}}/\chi b + 33\pi e^2 n_s/4\chi b$ (здесь N_{depl} – поверхностная плотность заряженных примесей в слое обеднения, находящемся при $z \gg z_0$), если в нем положить $N_{\mathrm{depl}} = -\chi E_0/4\pi e - n_s/2$. Минимизирующее полную энергию электронной системы значение $b_{\min}$ равно [1]

$$b_{\min} = \left(48\pi m e^2 N^*/\chi\hbar^2\right)^{1/3}, \tag{18}$$

где $N^* = N_{\mathrm{depl}} + (11/32)n_s$.

Вид инварианта (3) изменится, если в уравнении (1) появятся дополнительные члены, зависящие от E_0, n_s или $\Psi_0(z)$. В этой связи полезно привести выражение для инварианта, соответствующего уравнению, получающемуся путем минимизации функционала энергии, который выглядит более соответствующим ситуации, возникающей в эксперименте. Это уравнение отличается от (1) появлением дополнительного члена:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\Psi_0(z)}{dz^2} + \Psi_0(z)e\left[-E_0 z + \frac{2\pi e n_s}{\chi}z + \frac{4\pi e n_s}{\chi}\int\limits_0^z (\Psi_0(u))^2\,(u-z)\,du - \frac{2\pi e n_s}{\chi}\int\limits_0^\infty (\Psi_0(z))^2 z\,dz + f(z)\right] = \varepsilon_0\,\Psi_0(z). \tag{19}$$

Инвариант для этого уравнения получается совершенно аналогично (3) и имеет вид

$$\frac{\partial\varepsilon_0}{\partial E_0} + e z_0 + e n_s\frac{\partial z_0}{\partial n_s} = 0. \tag{20}$$

В заключение надо отметить, что существование и вид соотношений (3) и (20) были "угаданы" при анализе наших экспериментальных результатов, которые будут опубликованы в ближайшее время.

Автор выражает свою благодарность С. В. Иорданскому и В. Е. Бисти за полезные обсуждения, а Российскому фонду фундаментальных исследований и INTAS – за поддержку этой работы.

1. T. Ando, A. B. Fowler, and F. Stern, Reviews of Modern Physics **54**, 437 (1982) (Пер. Т. Андо, А. Фаулер, Ф. Стерн, *Электронные свойства двумерных систем*, М.: Мир, 1985).