Письма в ЖЭТФ, том 12, стр. 45 – 47 *5 июля 1970г.*

30

ПОВЕРХНОСТНЫЕ СОСТОЯНИЯ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ СО СЛОЖНОЙ ЗОННОЙ СТРУКТУРОЙ

А.В.Чаплик, А.А.Карпушин

В полупроводниках со сложной зонной структурой, таких как GaAs есть участки спектра, где электроны имеют отрицательную эффективную массу. Это означает, что отталкивающий потенциал может привести к возникновению связанных состояний для электронов.

Нас будет интересовать граница раздела двух сред с разными диэлектрическими постоянными, в частности, граница полупроводник – вакуум. В этом случае, как известно [1], на электрон в полупроводнике действует сила электростатического изображения, отталкивающая его от поверхности. Потенциальная энергия электрона имеет вид a/z, где $a = \dfrac{e^2}{4\kappa}\dfrac{\kappa - 1}{\kappa + 1}$, κ – диэлектрическая постоянная полупроводника, z – расстояние до поверхности.

Мы будем предполагать выполненными обычные условия применимости приближения эквивалентного гамильтониана (см., например, [2]). Уравнение для огибающей $\Psi(\mathbf{r})$ в разложении волновой функции электрона по функциям Ванье имеет вид ($\hbar = 1$)

$$[\,\epsilon(-i\nabla) + \frac{a}{z}\,]\,\Psi(\mathbf{r}) = E\,\Psi(\mathbf{r})\ , \qquad (1)$$

где $\epsilon(\mathbf{p})$ – закон дисперсии электронов в зоне. Поскольку потенциальная энергия зависит только от z, задача приводится к одномерной, т. е.

$$\Psi(\mathbf{r}) = \phi(z)\exp\{\,ip_x x + i p_y y\,\}\ ,$$

где $\phi(z)$ удовлетворяет уравнению

$$\left[\epsilon\left(-i\frac{\partial}{\partial z}(p_x, p_y)\right) + \frac{a}{z}\right]\phi(z) = E\,\phi(z)\,. \qquad (2)$$

Так как $\phi(z)$ является огибающей функцией и в рамках приближения эквивалентного гамильтониана ее характерный размер должен быть гораздо больше периода решетки, то граничным условием для $\phi(z)$ является ее обращение в нуль при $z = 0$. Оказывается, рассматриваемая задача имеет точное решение при произвольном виде дисперсии $\epsilon(\mathbf{p})$. Будем искать решение в виде (для k-го дискретного уровня)

$$\phi(z) = e^{-\gamma_k z}(A_k z^k + A_{k-1} z^{k-1} + \dots + A_1 z\,)\,. \qquad (3)$$

Разлагая $\epsilon\left(-i\left(\frac{\partial}{\partial z}\right), p_x p_y\right)$ по степеням оператора $i(\partial/\partial z)$, подставляя (3) и сравнивая коэффициенты при одинаковых степенях z, получим выражение для дискретных уровней (поверхностных зон) $E_k(p_x, p_y)$

$$E_k = \epsilon(i\gamma_k, p_x, p_y),$$

где γ_k есть корень уравнения

$$(\partial/\partial\gamma_k)\,\epsilon(i\gamma_k, p_x, p_y) = a/k, \quad k = 1, 2 \ldots \qquad (4)$$

Состояниям, локализованным у поверхности, соответствуют те корни уравнения (4), которые удовлетворяют условию $\mathrm{Re}\,\gamma_k > 0$. Для нахождения энергии E_k достаточно сравнить коэффициенты при z^k и z^{k-1} в (2). Что касается волновых функций электрона, то для нахождения их необходимо сравнивать коэффициенты при следующих степенях z. Приведем для примера выражения волновых функций первого и второго дискретных уровней

$$\Psi_1 = C_1 z e^{-\gamma_1 z}; \qquad \Psi_2 = C_2 \left(z - \frac{a}{\epsilon''_{\gamma\gamma}(i\gamma_2)} z^2\right) e^{-\gamma_2 z},$$

где C_1 и C_2 нормировочные константы.

В качестве примера рассмотрим объемноцентрированную кубическую решетку, в которой $\epsilon(p_z, p_x, p_y)$ в приближении сильной связи имеет вид

$$\epsilon(p_z, p_x, p_y) = \epsilon_0 + \Delta \cos\frac{1}{2}p_z a \cos\frac{1}{2}p_x a \cos\frac{1}{2}p_y a.$$

Для поверхностных зон получается выражение

$$E_k = \epsilon_0 + \Delta\sqrt{\cos^2\frac{1}{2}p_x a \cos^2\frac{1}{2}p_y a + \left(\frac{2a}{\Delta a k}\right)^2}.$$

Т. е. получается бесконечная система уровней, расположенная выше зоны и сгущающаяся к ее потолку.

В общем случае можно утверждать, что корни уравнения (4) близки к экстремумам $\epsilon(p_z, p_x, p_y)$ как функции p_z, так как a в атомных единицах примерно равно $\frac{1}{4\kappa} << 1$. Тогда можно провести разложение $\epsilon(p_z, p_x, p_y)$ вблизи экстремума и для уровня E_k получается обычный водородоподобный спектр:

$$E_k(p_x, p_y) = \frac{a^2}{2k^2} m^*(p_x, p_y).$$

Заметим, что эффективная масса зависит, вообще говоря от положения точки в двумерной зоне Бриллюэна. Уравнение (4) в общем случае может иметь и комплексные решения, которые соответствуют квазистационарным состояниям.

Описанные выше поверхностные состояния, как стационарные, так и квазистационарные, могут проявиться в неравновесных процессах, например, в оптическом поглощении. Кроме того, в сильных электрических полях электроны могут захватываться на такие уровни, что повлияет на поверхностную подвижность.

В заключение заметим, что аналогичным образом может быть рассмотрена модель с двумя близкими разрешенными зонами, для которых дисперсия имеет вид $\epsilon^2 = \Delta^2 + s^2p^2$, а огибающая функция удовлетворяет уравнению

Клейна – Гордона. Поверхностные уровни даются формулой

$$E_k = -\left(\Delta^2 + s^2 p_\perp^2\right)^{1/2}\left[1 + \frac{\Delta a^2}{s^2 k^2 \sqrt{\Delta^2 + s^2 p_\perp^2}}\right]^{-1/2},$$

где $p_\perp$ – проекция импульса на поверхность кристалла.

Таким образом, система уровней расположена вблизи потолка нижней зоны. Последний результат, по-видимому, не может быть непосредственно применен к полупроводникам с узкой запрещенной зоной. Действительно, в этом случае нижняя зона является заполненной валентной зоной полупроводника, и задача становится существенно многочастичной. Рассмотрение ее выходит за рамки настоящего сообщения.

По поводу проведенных расчетов необходимо сделать следующее замечание. Они справедливы при условии, что частота движения электронов на поверхностных уровнях ω_e много меньше обратного времени релаксации среды, ответственной за установление κ. В этом случае среда реагирует на мгновенное положение электрона, а не на усредненное распределение заряда с плотностью $|\Psi|^2$. Именно поэтому можно пользоваться обычным выражением для потенциала электростатического изображения. Фигурирующий в теории параметр $(4\kappa)^2$ достаточно велик как для ионных (GaAs, InSb), так и для неполярных (Ge, Si) полупроводников, так что ω_e оказывается меньше частоты оптического фонона, и, тем более, меньше частот связанных электронов полупроводника.

Институт физики полупроводников
Академии наук СССР
Сибирское отделение

Поступила в редакцию
28 мая 1970 г.

Литература

[1] Л.Д.Ландау, И.М.Лифшиц. Электродинамика сплошных сред, М., Физматгиз 1959.

[2] Ч.Киттель, А.Митчелл. Проблемы физики полупроводников, ИИЛ, 1957.

Письма в ЖЭТФ, том 12, стр. 47 – 50 *5 июля 1970 г.*

16

НАГРЕВ ПЛАЗМЫ УЛЬТРАКОРОТКИМИ ЛАЗЕРНЫМИ ИМПУЛЬСАМИ В ПРОЦЕССЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ТЕПЛОПРОВОДНОСТИ

О.Д.Захаров, О.Н.Крохин, П.Г.Крюков, Е.Л.Тюрин

Нагрев плазмы при фокусировании мощных ультракоротких ($10^{-11} - 10^{-12}$ *сек*) лазерных импульсов на твердую мишень [1] может сопровождаться распространением вглубь мишени электронной тепловой волны [2]. Рассмотрим наг-