УДК 539.21(07)

ББК В371.1я7

Д-13

**Давыдов С.Ю., Лебедев А.А., Посредник О.В.**

Д-13 Введение в физику наносистем.: Учеб. пособие, СПб.: Изд-во СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2012, с.

ISBN 5-7629-0962-X

В рамках единого подхода рассматривается широкий круг задач: от состояний в квантовых ямах до дробного эффекта Холла. Особое внимание уделяется электронной структуре низкоразмерных систем и их транспортным особенностям в наноразмерной области. Достаточно подробно рассматриваются свойства поверхности, в частности, ее адсорбционная способность. Для успешного усвоения материала пособия достаточно знаний математики и квантовой физики, получаемых студентами на первых трех курсах.

Настоящее учебное пособие возникло из курсов «Физики наноразмерных систем» и «Физика поверхности и границ раздела», которые один из авторов (С.Ю.Д.) на протяжении ряда лет читает магистрам кафедры микро- и наноэлектроники. Пособие также может быть полезно студентам и аспирантам, интересующимся данной проблематикой.

УДК 539.21(07)

ББК В371.1я7

Рецензенты: кафедра электроники СПбГИТМО; зав. лабораторией физико-химических свойств полупроводников ФТИ РАН, д-р физ.-мат. наук   
Е.И. Теруков.

Утверждено

редакционно-издательским советом университета

в качестве учебного пособия

ISBN 5-7629-0962-X  СПбГЭТУ «ЛЭТИ», 2012

**Введение**

Слово «нано», в общем случае означающее 10-9 от какой-то величины, сейчас в моде в применении к метру. Так что в дальнейшем мы будем говорить именно о нанометрах: 1 нм = 10-9 м, или 10 Ǻ. Введение такой специально выделенной из микрометров (10-6 м) и ангстремов (10-10 м) единицы обусловлено тем обстоятельством, что нанометровая шкала является естественной для описания суперсовременных приборных структур. Однако в настоящем учебном пособии мы не затрагиваем приборную тематику, а сосредотачиваемся на физических явлениях, происходящих в областях порядка несколькихмикр- или нанометров.

Весь материал пособия разбит на три части. Первая часть содержит четыре главы. В гл. 1 рассмотрены всевозможные потенциальные ямы, причем как изолированные, так и связанные. В принципе, этот материал изложен во многих учебниках, так как подобного рода задачи рассматривались еще на заре квантовой механики. Интересно отметить, однако, что в ту пору к такого рода задачам относились если как к чисто академическим, или как к грубо модельным: никто не предполагал, что такие ямы можно сформировать искусственно. Сейчас подобные объекты сплошь и рядом присутствуют в приборных структурах. Гл. 2 посвещена решеточным моделям одномерных (1*D*) и двумерных (2*D*) систем. До последнего времени считалось, что в природе чисто одномерной структуре отвечает только полимерная цепь, причем, в неустойчивом состоянии. Однако недавно были получены графены и силицены − 2*D* структуры, образованные соответственно атомами углерода и кремния. Более того, в настоящее время исследуются свойства края графеновой ленты, что можно считать прямым аналогом 1*D* структуры. Если в первых двух главах дано описание электронного спектра, то в гл. 3 рассматриваются фононы. Особое внимание уделяется локальным и интерфейсным колебаниям. Наконец, в гл. 4 рассмотрено туннелирование носителей через квантово-размерные структуры.

Вторая часть пособия посвящена, во-первых, вопросам транспорта носителей в мезоскопических системах (гл. 5). Учитывая важность процессов переноса, мы поместили в настоящее пособие достаточно обширное Приложение. Во-вторых, в гл. 6 рассмотрен (достаточно кратко) квантовый эффект Холла.

В третьей части пособия рассмотрены вопросы физики поверхности (гл. 7), адсорбции изолированных (одиночных) атомов (гл. 8) и их взаимодействию между собой при конечных концентрациях (гл. 9). В этих главах приводится целый ряд простых моделей, описывающих перестройки чистой поверхности, адсорбцию частиц на металлах и полупроводниках (как монокристаллических, так и разупорядоченных), наведенные адсорбцией изменения работы выхода и поверхностной проводимости адсорбционной системы, образования сверхрешеток адатомов.

Предлагаемое пособие адресовано, в первую очередь, магистрам кафедры микроэлектроники, но, как надеются авторы, будет небезынтересно аспирантам и молодым специалистам, причем не только тем, кто профессионально занимающимся «нанообластью», но и просто желающим расширить свой научный кругозор. Для этого, в частности, в конце пособия приведен список дополнительной литературы.

Тема вводного семинара: «Объекты нанофизики».

**Часть I**

**ГЛАВА 1. Квантовые ямы**

**1.1. Одномерные изолированные квантовые ямы**

* + 1. ***Прямоугольная потенциальная яма***

Будем моделировать одномерную (1*D*) квантовую яму (КЯ) потенциальной ямой, изображенной на рис. 1.1 и задаваемой выражением

 (1.1)

|  |
| --- |
| 1-1  *a*  0  *x*  *U*(*x*)  *U*0 |
| Рис. 1.1. Одномерная потенциальная яма |

Стационарное уравнение Шредингера (волновая функция  не зависит от времени) в общем случае имеет вид

, (1.2)

или для рассматриваемого случая

, (1.3)

где штрихи означают дифференцирование по . Отметим, что уравнения (1.2) и (1.3) описывают движение одной частицы массы ,  − приведенная постоянная Планка,  − полная энергия частицы.

Подставив (1.1) в (1.3), получим

  (область I); (1.4)

, (область II),  (область III). (1.5)

Теперь обсудим граничные условия, необходимые для решения уравнений (1.4), (1.5). Во-первых, справа и слева от границ волновые функции должны быть равны друг другу. Следовательно,

, . (1.6)

Данное условие возникает из простого требования: вероятности нахождения электрона  не должны испытывать скачков на границах областей.

Второе граничное условие возникает из требования непрерывности плотности потока вероятности  через границы КЯ вида

, (1.7)

или в нашем 1D случае

. (1.8)

Полагая  и , получим с учетом (1.6)

, . (1.9)

Здесь молчаливо предполагалось, что масса  частицы одинакова во всех областях. По-другому обстоит дело в гетероструктурах, где эффективные массы в областях I, II и III не обязательно одинаковы. Тогда вместо (1.9) получим

, . (1.10)

Так как оператор дифференцирования с точностью до множителя  есть оператор импульса , то условия (1.10) означают равенство скоростей  на границах.

Тут уместно провести аналогию с классической плотностью тока , где − плотность электронов. Так как плотность электронов на границе скачка не испытывает (считаем, что границы не содержат ловушек), то не должны испытывать скачка и их скорость.

Вообще говоря, граничные условия (1.6) и (1.9) удобно объединить, записав и приравняв на границах так называемые логарифмические производные :

, . (1.11)

Перейдем к решению уравнения (1.3) и вначале рассмотрим области  и . Легко сообразить, что волновая функция в этих областях при  должна затухать. Пусть

, (1.12)

где верхний знак экспоненты относится к области , нижний − к области . Подставив эту функцию в уравнение (1.5), получим

. (1.13)

При  волновые функции на границах КЯ обращаются в 0: частица не может пройти под бесконечный барьер. В этом случае движение частицы происходит лишь в области I (). Общий вид решения в этой области имеет вид

, (1.14)

что может быть переписано в виде

, (1.15)

где *a*, *b*, *c* − коэффициенты,  − фаза. Подстановка функций (1.14) или (1.15) дает

. (1.16)

Условие дает , а условие  приводит к уравнению , что дает , где  − целые числа, начиная с 1. Тогда находим

, = 1, 2, 3, … , (1.17)

. (1.18)

Главное, на что следует обратить внимание, это то, что . Здесь впервые проявляется зависимость энергии от размера системы (пространственное квантование). Расстояние  между -ым и -ым уровнями в КЯ равно

. (1.19)

Отсюда следует, что переход к  приводит к  и  (для любого конечного *n*). Этот предел моделирует переход от КЯ конечной ширины к металлу с квазинепрерывным электронным спектром.

Для проведения численных оценок удобно учесть, что  = 7.62 эВ∙Ǻ2, где  − масса свободного электрона. Тогда

,

где  измеряется в Ǻ. В яме шириной  = 100 Ǻ и = 0.067, как это имеет место в гетероструктуре AlGaAs − GaAs − AlGaAs, получим для основного состояния  = 1 значение 56 мэВ. Так как глубина ямы  в этой структуре равна 0.3 эВ, приближение бесконечно глубокой ямы выполняется, так как .

Рассмотрим теперь, как изменяется волновая функция и вероятности и при  (рис. 1.2). Из рисунка следует, что при больших значениях  вероятность пребывания частицы в любой точке ямы практически равновероятна. Это есть ни что иное, как переход от квантового описания системы к классическому. При  зависимость от  сглаживается.

|  |
| --- |
|  |
| Рис. 1.2. Плотность вероятности для основного и возбужденных  состояний |

Пусть теперь потенциальная энергия  является конечной величиной. Используя в качестве пробной функции выражение (1.15), можно показать, что из условия непрерывности логарифмической производной  получается уравнение

. (1.20)

Введя переменную , получим при нечетном  уравнение

, , (1.21)

причем должны учитываться только те корни, для которых . При четном получим уравнение

, (1.22)

причем надо брать корни, для которых . По корням уравнений (1.21), (1.22) определяются уровни энергии

. (1.23)

Число уровней при  конечно. В частности, для неглубокой ямы, в которой , имеем , и уравнение (1.22) не имеет корней вовсе. Уравнение же (1.21) имеет один корень (при верхнем знаке в правой части)

. (1.24)

Таким образом, в яме имеется один уровень энергии

, (1.25)

расположенный вблизи её верха.

Отметим, что рассмотренная модель удобна для грубой оценки энергетического спектра тонкой пленки.

* + 1. ***Треугольная потенциальная яма***

Пусть потенциальная яма определяется уравнением (рис. 1.3)

|  |
| --- |
| 1-3  *E5*  *E4*  *E3*  *E2*  *E1*  *E0*  *V*(*x*) |
| Рис.1.3. Квантовые состояния  в треугольной квантовой яме |

 (1.26)

где − величина заряда электрона,  − напряженность электрического поля. Стационарное уравнение Шредингера имеет вид

. (1.27)

Введением переменной

, (1.28)

уравнение (1.27) сводится к

. (1.29)

Уравнение (1.29) не содержит параметра энергии. Поэтому, получив его решение, удовлетворяющее необходимым условиям конечности, тем самым получим собственную функцию для произвольных значений энергии.

Не вдаваясь в довольно сложное решение уравнения (1.27), отметим, что его собственными функциями являются функции Эйри вида

, (1.30)

где переменная интегрирования  является мнимой. Исходя из физических соображений, необходимо учесть, что , так как частица не может проникнуть под бесконечный барьер. С другой стороны, ясно, что  при . Расчеты показывают, что уровни энергии  в такой яме имеет вид

, = 0, 1, 2, …, (1.31)

где  − численные коэффициенты ( 2.34), энергии уровней  отсчитываются от дна ямы. Таким образом, энергия основного состояния

. (1.32)

Выражение (1.32) − точное значение, знак приближенного равенства указывает только на приближенное значение коэффициента . Для возбужденных значений () имеем асимптотическое выражение

. (1.33)

Для численных оценок (помимо значения = 7.62 эВ∙Ǻ2) удобно использовать равенство = 14.40 эВ∙Ǻ. Так, например, для = 0.067 и = 105 эВ/см имеем 90 мэВ. Чем меньше величина поля , т. е. чем шире яма (для данной энергии), тем ниже расположен уровень . Этот результат совпадает качественно со случаем прямоугольной ямы.

При  разность энергий , а не , как в случае прямоугольной ямы (1.19). Волновые функции, соответствующие уровням энергии , изображены на рис. 1.3. Отметим, что модель треугольной ямы часто используется для оценки энергии квазилокализованных состояний, возникающих на интерфейсах в гетеропереходах.

* + 1. ***Параболическая потенциальная яма***

При расчете изгиба зон на границе гетеропереходов в режиме полностью истощенной примеси потенциальная яма, образующаяся в зоне проводимости некубического политипа, приобретает параболическую форму (рис. 1.4):

 (1.34)



Рис. 1.4. Параболический потенциал.

где  – толщина истощенной области и энергия *U* отсчитывается от вакуума,  – глубина потенциальной ямы. При  потенциал , при  потенциал .

Уравнение Шредингера для такого потенциала может быть сведено к виду

, (1.35)

где ,  (). Уравнение с таким потенциалом не имеет точного аналитического решения. Однако, рассматрев предел , легко показать, что электростатическое поле

. (1.36)

При этом величину поля логично связать с эффективной шириной ямы . Это значение поля можно теперь использовать в формуле (1.31).

Следует подчеркнуть, что параболической яма возникает в полупроводниковой области барьера Шоттки в режиме истощения примесей.

* + 1. ***Плотность состояний в одномерных квантовых ямах***

Важной характеристикой любой электронной системы наряду с ее энергетическим спектром является плотность состояний . В массивном образце с параболическим законом дисперсии  возрастает с увеличением энергии от края разрешенной зоны как . В 1D КЯ уровни  являются локальными, так что им отвечают плотности состояний , где  есть дельта-функция Дирака. Таким образом, плотность состояний одномерной системы  есть

. (1.37)

**1.2. Двумерные и трехмерные изолированные квантовые ямы**

***1.2.1. Потенциальный ящик с бесконечными стенками***

Пусть двумерный (2*D*) потенциальную яму с бесконечными стенками

 (1.38)

Воспользовавшись результатами для одномерной прямоугольной ямы (см. (1.17)), легко сообразить, что энергия  и волновые функции  имеют следующий вид:

, , (1.39)

. (1.40)

К чему же приводит в данном случае переход от структуры 1*D* к структуре 2*D*? Пусть для определенности имеем . Основное состояние системы отвечает условию , при котором энергия  равна

.

Положив , получем выражение, аналогичное (1.17) для 1*D* структуры. Здесь, таким образом, никакого принципиального отличия не наблюдается.

В 2*D* системе, однако, появляются дополнительные (по отношению к случаю 1*D*) состояния, обязанные своим существованием второму измерению. Более того, в 2*D* системе возможно случайное (т.е. не связанное с какими-либо внутренними фундаментальными свойствами системы) вырождение. Так, например, легко показать, что при условии  появляется вырождение вида . В 1*D* системах вырождение невозможно.

***1.2.2. Потенциальный цилиндр***

Задав потенциал в виде

 (1.41)

где . Стационарное уравнение Шредингера внутри «круга» имеет вид

. (1.42)

Переходя к полярным координатам , т. е. соответствующим образом записывая оператор Лапласа , получаем

. (1.43)

Положим . Тогда для основного состояния (с проекцией момента )

 (1.44)

или

. (1.45)

Можно показать, что

, (1.46)

где  − функция Бесселя нулевого порядка и . Энергия основного состояния определяется первым корнем функции Бесселя  2.40, что дает

. (1.47)

Нетрудно видеть, что выражение (1.47) аналогично (1.17).

Отметим, что двумерные модели, описанные в п. 1.2.1 и 1.2.2, могут быть применены к грубому описанию электронных состояний в островках адсорбированных атомов.

***1.2.3. Потенциальный параллелепипед***

Пусть потенциал имеет вид

 (1.48)

Воспользовавшись результатами для одномерной прямоугольной ямы (1.17), легко показать, что энергия  и волновые функции  имеют следующий вид:

, , (1.49)

. (1.50)

Сопоставление со случаем потенциального ящика показывает, что в 3*D* системе появляются дополнительные по отношению к 2*D* уровни и увеличивается вероятность вырождения.

***1.2.4. Потенциальная сфера***

Пусть требуется найти собственные состояния и собственные функции для сферы радиуса  с потенциалом  при  и  при . Тогда внутри сферы уравнение Шредингера имеет вид

. (1.51)

Переходя к сферическим координатам , т. е. соответствующим образом записывая оператор Лапласа , получим

. (1.52)

Как известно, при движении в центрально-симметричном поле момент импульса сохраняется. Будем рассматривать стационарное состояние с определенным значением момента  и его проекции . Заданием значений  и определяется угловая зависимость волновых функций. Соответственно этому, ищем решение уравнения (1.52) в виде

, (1.53)

где  − сферическая функция. Теперь можно показать, что при = 0 радиальная функция  удовлетворяет уравнению

. (1.54)

Подстановкой

 (1.55)

уравнение (1.54) сводится к

. (1.56)

По аналогии с (1.15), решение уравнения (1.56) записывается как , где . Тогда . Из граничного условия  получается  ( = 1, 2, …). Отсюда

, = 1, 2, …, (1.57)

что совпадает с выражением (1.17) для одномерной прямоугольной ямы. К этому приводит сферическая симметрия системы.

Радиальные волновые функции

,  (1.58)

При  имеем .

Уровни энергии для движения частиц с моментом = 0 в сферической прямоугольной потенциальной яме определяются для потенциала вида:  при ,  при .

Легко сообразить, что плотности состояний для ящика и параллелепипеда есть

, (1.59)

. (1.60)

Для сферы плотность состояний

. (1.61)

Модели, описанные в п. 1.2.3 и 1.2.4, могут быть использованы для оценки электронных состояний в квантовых точках.

* + 1. ***Кулоновская яма***

Пусть потенциал . Это есть ни что иное как задача об атоме водорода, если положить . Энергия связанных состояний определяется как

, = 1, 2, …, (1.62)

а волновая функция основного состояния пропорциональна , где  (при  радиус  переходит в радиус Бора = 0.529 Å).

* 1. **Сдвоенные квантовые ямы**

До сих пор мы рассматривали одиночные (изолированные) квантовые ямы. Однако в современных электронных и оптоэлектронных приборах часто используются структуры со связанными квантовыми ямами. Для выяснения влияния, оказываемого сближением изолированных квантовых ям, рассмотрим систему, состоящую из двух одинаковых квантовых ям, разделенных проницаемым потенциальным барьером (рис. 1.5).



Рис. 1.5. Потенциальная структура и волновые функции для двухъямной системы.

Начнем с качественного рассмотрения. Волновая функция является решением уравнения (1.2) (или (1.3)) с потенциалом, изображенным на рис. 1.5. Если квантовые ямы достаточно удалены друг от друга, то между ними волновая функция практически равна нулю. Для области вблизи квантовой ямы волновая функция  будет практически совпадать с волновой функцией изолированной квантовой ямы с тем, однако, отличием, что величина  вследствие нормировки уменьшится вдвое. Симметричная волновая функция для наинизшего квантового состояния изображена на рис. 1.5, *а*. Возможно, однако, и другое решение – асимметричное, изображенное на рис. 1.5, *б*. Между значениями энергии для этих решений разницы практически нет, что следует из одинаковой формы функций . Действительно, средняя кинетическая энергия пропорциональна , средняя потенциальная энергия , так что какая-либо зависимость от знака волновой функции исчезает.

При сближении квантовых ям волновые функции изменяются и в пределе сливаются в одну яму удвоенной ширины  (рис. 1.6). Так как энергия состояний в изолированной яме шириной пропорциональна , то теперь полная энергия основного состояния (рис. 1.6, *а)* будет составлять приблизительно ¼ от полной энергии основного состояния в яме, изображенной на рис. 1.5, *а*. С другой стороны, антисимметричная волновая функция, изображенная на рис. 1.6, *б*, отвечает состоянию с , так что полная энергия пропорциональна отношению , которое совпадает с соответствующим отношением для основного состояния изолированной квантовой ямы ширины .



Рис. 1.6. Волновые функции для предельного случая слияния двух ям.

Зависимость энергии для этих двух состояний от расстояниямежду квантовыми ямами изображена на рис. 1.7. Для обоих состояний исходным принято значение  при , где под  понимается энергия частицы восновном состоянии для прямоугольной квантовой ямы конечной глубины. Из рис. 1.7 следует, что при любом значении  уровень , соответствующий одиночной квантовой яме, расщепляется на два уровня (образуется дублет), причем это расщепление растет с уменьшением расстояния между ямами. При этом, если частица находятся в основном состоянии, то волновые функции в обеих квантовых ямах оказываются в одной фазе, если же частица находится в первом возбужденном состоянии, то волновые функции оказываются в противофазе, т.е. отличаются друг от друга на .



Рис. 1.7. Зависимость энергии основного (симметричного) состояния (*а*) и первого возбужденного (античимметричного) состояния (*б*) от расстояния между связанными квантовыми ямами.

Рассмотрим более подробно энергетический спектр в системе, состоящей из двух квантовых ям, разделенных дельтаобразным потенциалом вида

 (1.63)

где . Для состояние частицы в этом потенциале описывается уравнением Шредингера

. (1.64)

Соответствующие волновые функции имеют вид

, (1.65)

где индекс 1 относится к области , индекс 2 – к области и .

С учетом граничных условий в точках  полдучаем

. (1.66)

При наличии дельтаобразного потенциала граничные условия принимают вид

, . (1.67)

Поясним выражения (1.67). Из уравнения Шредингера (1.64) вытекает непрерывность волновой функции в точке  и разрывный характер ее производной. Величина скачка  должна быть такой, чтобы дельтообразное слагаемое в  (производная разрывной функции пропорциональна -функции) компенсировало член  в левой части (1.64). Проинтегрировав (1.64) по узкой области  и устремляя  к нулю, получим выражения (1.67).

Из условий (1.67) получаем выражение, определяющее спектр четных разрешенных состояний состояний в данной системе:

. (1.68)

Анализируя (1.68) в пределе и (низкоэнергетический предел), для четных (симметричных) состояний получим

, (1.69)

где − энергия -го уровня (=1, 2, 3, …) для прямоугольной потенциальной ямы с бесконечными стенками и шириной (см.(1.17)).

Для нечетных волновых функций волновая функция . Согласно (1.66) данное условие выполняется, если . При этом энергия частицы,находящейся в нечетном (антисимметричном) состоянии, будет определяться выражением

, (1.70)

т. е. в нечетном состоянии частица как бы не замечает наличие дельтообразного потенциала в точке  энергетически симметричной системы. Отметим, что , как и на рис. 1.7.

* 1. **Дираковская потенциальная гребенка**

Моделью Кронига-Пенни называют одномерную структуру эквидистантно расположенных одинаковых прямоугольных потенциальных барьеров. В рамках этой модели можно достаточно просто описать основные черты зонной структуры идеального кристалла. Более того, в модель Кронига-Пенни можно ввести точечный дефект и свободную поверхность и понять, к каким изменениям электронного спектра это приводит. Здесь мы рассмотрим частный случай модели Кронига-Пенни – так называемую дираковскую потенциальную гребенку, где в качестве барьеров задаются дельтаобразные потенциалы вида (1.63). В соответствии со сказанным положим:

, (1.71)

что моделирует одномерный бесконечный кристалл (рис. 1.8).



Рис. 1.8. Схематическое изображение дираковской потенциальной гребенки.

Общее решение уравнения Шредингера с потенциалом (1.71) для области  имеет вид

, (1.72)

где . Рассматривая независимые решения, удовлетворяющие условию , получаем

, . (1.73)

В то же время сшивание в точке (см. (1.67)) дает

 (1.74)

Исключив отсюда , с помощью (1.73), получаем систему двух линейных относительно , уравнений. Условие существования нетривиального решения приводит к соотношениям

, , (1.75)

. (1.76)

Отсюда

. (1.77)

При любом фиксированном значении уравнение (1.77) определяет два значения , соответствующие двум независимым решениям уравнения Шредингера, при этом . При  оба значения  вещественны. При этом оба решения возрастают на больших расстояниях: решение  стремиться к бесконечности при , решение − при . Такие решения, однако, не соответствуют физически реализуемым состояниям. Последним соответствуют значения , для которых , т. е., или

. (1.78)

Таким образом, допустимые значения  образуют зоны. Если положить , где , − квазиимпульс (не путать с !), то согласно (1.75) уравнение для определения зависимости  (здесь − номер зоны, не путать с номером узла в (1.71)-(1.74)) принимает вид

. (1.79)

Графическое решение уравнения (1.79) представлено на рис. 1.9.



Рис. 1.9. К решению уравнения (1.79).

Отметим основные свойства полученного спектра.

1. Зависимостьот является четной, так что состояния, различающиеся знаком квазиимпульса, являются двумя независимыми состояниями, соответствующими двукратно вырожденному уровню .
2. Зоны не перекрываются. При все они расположены в области , причем , = 0, 1, … При  зоны узки, с увеличением их ширина увеличивается и при  они почти полностью занимают указанный выше интервал. При изменении знака  нижняя зона опускается в область  (при этом − мнимая величина).
3. При значениях энергии, близких к границам зоны (при и ), зависимость является парабюолической, т. е. .

В заключение отметим, что собственные функции гамильтониана в данной задаче не нормируемы на 1, так что локализованные стационарные состояният частицы в периодическом потенциале отсутствуют; волновая функция (1.72), (1.73) соответствует частице, свободно распространяющейся по кристаллу с квазиимпульсом .

* 1. **Вакансия в дираковской потенциальной гребенке**

Пусть периодический потенциал задан в виде

. (1.80)

В (1.80) учтено, что дельтообразный потенциал в узле  отсутствует (рис. 1.10). Это и есть вакансия.



Рис. 1.10. Схематическое изображение наличия вакансии в дираковской потенциальной гребенке.

Начнем с того, что разрешенные зоны, полученные в п. 1.4, являются разрешенными и в настоящем случае. Отличие от случая строго периодического потенциала состоит лишь в том, что теперь независимые решения уравнения Шредингера уже не отвечают определенному значению квазиимпульса : имеет место рассеяние квазиимпульса на дефекте решетки. При этом двухкратное вырождение уровней сохраняется.

Кроме этого, появляются новые значения энергии, соответствующие локализованным вблизи дефекта состояниям частицы. Для их определения рассмотрим решения уравнения Шредингера, отвечающие определенной четности относительно отражения .

Для четных решений при имеем . В то же время решение уравнения Шредингера должно совпадать с решением уравнения Шредингера в периодическом потенциале, удовлетворяющим условию  с (другому независимому решению отвечает , такое решение возрастает при ). Это решение при имеет вид

, (1.81)

где вновь . Из условия совпадения  с при  находим , , а сшивание решения (1.81) в точке приводит к соотношениям

, , (1.82)

второе из которых определяет искомые четные уровни. Отметим свойства спектра этих уровней.

1. Уровни − дискретные, число их бесконечно.
2. Уровни расположены по одному между соседними зонами непрерывного спектра, и в случае самый нижний из них лежит ниже основной зоны.
3. По мере увеличения энергии уровня, как видно из (1.82), имеем . При этом область локализации частицы вблизи дефекта неограниченно увеличивается; для нормированной на 1 волновой функции уровня

.

В связи с этим отметим, что в случае  волновая функция нижних таких уровней  (= 0, 1, …) с  локализованы в области , не превосходящей  (при этом ) и близки к волновым функциям стационарных состояний частицы в бесконечно глубукой потенциальной яме шириной .

Что же касается новых нечетных уровней, то в условиях данной задачи они отсутствуют (здесь проявляется специфика одноцентрового дельтообразного потенциала).

* 1. **Полубесконечная дираковская потенциальная гребенка**

Пусть частица движется в потенциале вида

 (1.83)

Такой потенциал моделирует полубесконечный кристалл и вводит в рассмотрение поверхность (рис. 1.11).



Рис. 1.11. Полубесконечная дираковская потенциальная

гребенка.

Независимые решения уравнения Шредингера при , где частица свободна, известны. В области же  два независимых решения для любого значения  обладают свойством , причем . При этом для значений энергии из разрешенных зон в бесконечном кристалле оба эти решения не возрастают при , а для остальных значенийневозрастающим является только одно: с (оно убывает при ). Имея в виду эти замечания, легко сделать суждения о характере спектра частицы.

1. При  спектр непрерывен. При этом значения энергии, принадлежащие разрешенным зонам бесконечного кристалла, двукратно вырождены (в соответствующих состояниях частица свободно движется по всему пространству, с некоторой вероятностью отражаясь от границ кристалла). Остальные значения невырожденные, при этом волновая функция убывает в глубь кристалла (частицы с такой энергией полностью отражаются от кристалла).
2. При  спектр имеет такую же зонную структуру, как и в случае бесконечного кристалла. При этом уровни уже невырожденные; волновая функция убывает с увеличением расстояния от кристалла, а при  представляет определенную суперпозицию состояний со значениями квазиимпульса  (частица с такой энергией движется внутри кристалла, отражаясь от его границы).
3. Кроме того, при  могут существовать изолированные уровни, которым отвечают состояния частицы, локализованные вблизи границы кристалла.

Для их нахождения рассмотрим решения уравнения Шредингера, убывающие при . При оно имеет вид , где , а при  для значений  его можно записать в виде

, , . (1.84)

Сшивая решения в точках  и и положив , получим

, , ,

.

Отсюда

, (1.85)

.

Уравнение (1.85) определяет спектр рассматриваемых состояний; число уровней зависит от параметров потенциала (их может не быть вообще). Они расположены между зонами разрешенных энергий для бесконечного кристалла. При изменении параметров потенциала положение таких уровней также изменяется. При этом может происходить как появление новых связанных состояний, так и исчезновение уже существующих за счет ухода уровня в ближайшую зону (состояние делокализуется).

Не прибегая к детальному анализу спектра (1.85), ограничимся для иллюстрации рассмотрением одного частного случая, когда  и (кристалл, состоящий из дельтообразных ям), причем . При этом в области энергий  из (1.85) следует, что , где = 1, 2, …, а , причем . Для таких уровней (существующих между каждыми соседними зонами)

, (1.86)

так что  (при этом , т. е. область локализации состояния простирается далеко в глубь кристалла). В случае  в этой области связанных состояний нет (для решений уравнения (1.85)). Хотя такие состояния и появляются по мере увеличения  (в момент появления их энергия ), в дальнейшем уровень сливается с зоной.

**Задачи к гл. 1**

* 1. Воспользовавшись соотношением неопределенности для координаты и импульса, найти энергию основного состояния электрона в прямоугольной потенциальной яме с бесконечными стенками.
  2. То же, что в задаче 1.1, но для треугольной потенциальной ямы.
  3. То же, что в задаче 1.1, но для кулоновского центра.
  4. То же, что в задаче 1.1, но для линейного осциллятора, положив , где  − частота собственных колебаний осциллятора.
  5. Для значений энергии, близких к границам зоны бесконечной дираковской потенциальной гребенки и , найти коэффициенты , входящие в закон дисперсии .

Тема семинара: «Поверхностные состояния».**ГЛАВА 2.** **Решеточные модели низкоразмерных систем**

**2.1. Метод функций Грина**

Рассмотрим двухатомную молекулу, для чего представим себе, что молекула состоит из атомов, на внешних *s*-уровнях которых находится по одному электрону. Пусть в отсутствии взаимодействия энергии этих электронных состояний равны , а их волновые функции есть . Здесь и далее используются обозначения Дирака, где под функцией  понимается волновая *s*-функция -го атома , а под функцией  − комплексно-сопряженная функция. Таким образом, имеем

, (2.1)

где  – гамильтониан, описывающий изолированный атом. Введем теперь оператор взаимодействия  между этими состояниями, матричные элементы которого есть:  (в стандартных обозначениях это интегралы  и ). Будем искать волновую функцию взаимодействующей системы в виде суперпозиции состояний  и , отвечающих, соответственно, связывающему (bonding, индекс *b*) и антисвязывающему (antibonding, индекс *a*) остояниям

. (2.2)

Волновые функции  является собственными функциями гамильтониана . Пренебрегая перекрытием функций  и , в соответствии с общей теорией уровни энергии  (здесь и ниже энергетическую переменную будем обозначать через , а не через  как ранее) системы двух атомов находятся из секулярного уравнения

, (2.3)

решение которого дает

. (2.4)

Таким образом, в системе в результате взаимодействия возникают два различных состояния: антисвязывающее  и связывающее . Вероятность нахождения электрона в этих состояниях определяется величинами , которые, как не трудно показать, равны , где полярность связи . Плотность электронных состояний  на уровнях 1 и 2 можно представить в виде

. (2.5)

Отсюда, в частности, следует, что на каждом атоме, имевшем поначалу лишь один уровень, в результате взаимодействия возникают два уровня – связывающий и антисвязывающий. Иначе говоря, взаимодействие двух атомов приводит к расщеплению их уровней на два подуровня, локализованных на каждом из этих атомов. Нетрудно сообразить, что, приведя в контакт *N* атомов, мы получим систему *N* уровней, и если *N* достаточно велико, то вместо локальных уровней образуется зона электронных состояний.

Отметим, что вся зависимость от межатомного расстояния  включена в параметр :  при .

Та же задача может быть решена с помощью *метода функций Грина*. Определим невозмущенную функцию Грина (т. е. функцию Грина для невзаимодействующих атомов) через  операторным соотношением , что дает

. (2.6)

Функцию Грина возмущенной (взаимодействующей) системы  определим из операторного *уравнения Дайсона*:

, (2.7)

где и . В нашем случае (2.7) сводится к следующей системе уравнений

 (2.8)

Отсюда

. (2.9)

Умножая числитель и знаменатель выражения (2.9) на , получим

, (2.10)

где учтено, что . Подставляя выражения (2.6) в (2.10), получаем

. (2.11)

Для функции Грина  имеем

. (2.12)

В соответствии с общей теорией, энергетический спектр системы дается полюсами функций Грина, т. е. нулями знаменателя:

. (2.13)

Полученное (2.13) совпадает с уравнением (2.3), а его решение − с (2.4).

Для нахождения плотности состояний представим функцию Грина (2.11) в виде

, (2.14)

где уровни энергии  даются уравнениями (2.4),  − бесконечно малая положительная величина, *i* – мнимая единица, *А* и *В* − весовые множители. Приводя (2.14) к общему знаменатель и приравнивая полученное выражение к (2.11), получим  и . Теперь воспользуемся соотношением теории функций комплексного переменного

. (2.15)

В соответствии с общей теорией, плотность состояний системы определяется мнимой частью функции Грина:

. (2.16)

С учетом (2.14) − (2.16), получим плотность состояний вида (2.5).

**2.2. Однозонная модель линейной цепочки**

Перейдем теперь к нахождению закона дисперсии электрона, т. е. зависимости его энергии  от волнового вектора . В качестве простейшей модели кристалла рассматривается линейная цепочка, состоящая из одинаковых атомов (одноатомная цепочка), обладающих лишь одной *s*-орбиталью, которой (в случае изолированного атома) соответствует волновая функция  и энергия . При этом уравнение Шредингера для гамильтониана , отвечающего изолированному атому, имеет вид

, (2.17)

Определим функцию Грина невозмущенного гамильтониана  по общему правилу: , что дает

, (2.18)

где  – символ Кронекера (= 1 при *n* = *m* и 0 при *n* ≠ *m*). Таким образом, функция Грина изолированного атома имеет только диагональную компоненту , где  – номер атома в цепочке, = 0 – «нулевой атом», т. е. начало отсчета атомов.

Введем волновую функцию атомной цепочки , отвечающую -му атому. Учтем трансляционную симметрию, положив , где  – волновая функция атома, находящегося в узле цепочки с координатой *n* = 0, *с* – постоянная цепочки,  – волновой вектор цепочки, значения которого лежат внутри первой одномерной зоны Бриллюэна: . Предполагается также, что функции  составляют полный набор и ортонормированны:

. (2.19)

Определим теперь функцию Грина  возмущенного гамильтониана , где  – периодический потенциал цепочки: .

Для нахождения функции Грина  пользуются уравнением Дайсона:

, или

, (2.20)

где подразумевается суммирование по повторяющимся индексам и , . Исходя из трансляционной симметрии цепочки, легко показать, что

, (2.21)

откуда следует тождество .

Будем считать, что взаимодействуют только соседние атомы цепочки, так что

, (2.22)

где . Отметим, что здесь символ *V* обозначает уже число, а не оператор. Тогда из уравнения Дайсона имеем

, .

Отсюда

 (2.23)

Как уже говорилось выше, полюса функции Грина определяют собственные значения энергии системы, в данном случае, цепочки. Следовательно, решение уравнения

 (2.24)

определяет энергетический спектр цепочки. Подставляя в (2.24) , получим закон дисперсииэнергии электронов для цепочки:

, (2.25)

где нижний индекс означает, что выражение относится к одномерной структуре.

Физический смысл полученных результатов заключается в том, что дискретные уровни изолированных атомов расширяются в зоны, ширина которых  пропорциональна величине матричного элемента  и числу ближайших соседей *z*, которое в случае цепочки равно 2: , (так как).

Энергетическая плотность состояний  вычисляется в рамках метода функций Грина стандартным образом. Зная закон дисперсии, можно представить функцию Грина в виде

. (2.26)

Здесь и далее мы опускаем нижние индексы. Найдем «энергетическую» функцию Грина , проинтегрировав по зоне Бриллюэна:

. (2.27)

Для вычисления интеграла (2.27) воспользуемся табличной формулой

, . (2.28)

С учетом (2.28) при , интегрирование (2.27) дает

 при , (2.29)

 при , (2.30)

где выражение  означает, что при отрицательных значениях ω перед формулой берется знак минус, при положительных – плюс. Явный вид  можно найти, воспользовавшись выражением для  и дисперсионными соотношениями, о чем мы будем говорить в дальнейшем.

Так как , получим

 (2.31)

Разрывы плотности состояний на границах зоны обусловлены одномерностью системы. Разумеется, чисто одномерных структур в природе нет. Любые «одномерные» системы (например: нитевидные кристаллы, полимерные цепи, цепочки адсорбированных атомов) или не являются абсолютно одномерными (как нитевидные кристаллы), или взаимодействуют с окружением (матрицей), т.е. являются квазиодномерными.

От величины постоянной решетки зависит, во-первых, ширина зоны Бриллюэна (), и, во-вторых, величина матричного элемента . От числа атомов в цепочке  зависит густота заполнения пространства: «расстояние» между соседними состояниями пропорционально .

**2.3. Двухзонная модель линейной цепочки**

Рассмотрим цепочку, образованную чередующимися атомами *а* и *b* (двухатомная цепочка), расстояние между которыми по-прежнему равно *с*, а постоянная решетки – 2*с*. Пусть в изолированном состоянии им отвечают волновые функции  и  и энергии  и . Для простоты предположим, что функции  соответствуют *s*-орбиталям, а функции   
− *р*-орбиталям, вытянутым вдоль цепочки. Соответствующие функции Грина равны  и . Будем считать, что атомы *a* находятся в нулевом и четных узлах цепочки, а атомы *b* – в нечетных. Тогда для цепочки получаются следующие трансформационные соотношения для волновых функций  и , где 

Исходя из уравнения Дайсона, для функций Грина возмущенного гамильтониана  и  с учетом взаимодействия ближайших соседей определяются следующие уравнения:

,



.

При выводе этих выражений учитывалось, что и (изменение знака матричных элементов связано с переменой направления *р*-орбитали). Окончательно получим

, (2.32)

. (2.33)

Отметим, что . Для нахождения законов дисперсии имеем уравнение (полюса функций Грина)

.

Решая это уравнение, находим две полосы сплошного спектра

 (2.34)

, (2.35)

где , , функция описывает дисперсию электронов в зоне проводимости, дно которой имеет энергию , тогда как отвечает дисперсии в валентной зоне, потолок которой соответствует энергии . Ширина запрещенной зоны, таким образом, равна . Щель на границе зоны Бриллюэна равна . Ширина зоны проводимости  равна ширине валентной зоны : . Опуская нижние индексы, перепишем функции Грина для атомов *а* и  в виде

 (2.36)

. (2.37)

Для нахождения плотности состояний  необходимо вычислить функции Грина

. (2.38)

Так как этот интеграл аналитически не берется, упростим задачу, положив . Тогда , а для зон получим



где мы предположили, что . Приняв за нуль энергии центр запрещенной зоны, т. е. положив , имеем . Для зон тогда можно записать следующие выражения

. (2.39)

Отсюда следует, что задача свелась к двум одноатомным цепочкам. Если для грубой качественной оценки положить весовые множители (см. (2.36)), то плотность состояний двухатомной цепочки сведется к полусумме плотностей состояний двух независимых одноатомных цепочек, центрированных при значениях энергий .

Отметим, что полученные в этом разделе результаты справедливы и для случая, когда атомы *a* и *b* идентичны, но в расчет принимаются два сорта состояний −  и . В этом случае вместо энергий  и  нужно брать атомные термы  и . В тетраэдрических полупроводниках в связи участвуют *sp*3-орбитали. Следовательно, в результате расчетов, аналогичных проделанным здесь, также получаются две зоны – зона проводимости и валентная. Следует также обратить внимание, что в двухзонной задаче имеются три главных параметра: энергии  и  орбиталей и энергия их взаимодействия *V*.

**2.4. Одноатомная плоская решетка**

В рамках метода сильной связи можно показать, что при учете взаимодействия только ближайших соседей закон дисперсии электронов может быть представлен в виде

, (2.40)

где − периодическая функция (с периодом обратной решетки), меняющаяся от − 1 до +1 и зависящая от группы симметрии конкретного кристалла. Таким образом, ширина зоны *W* для квадратной 2*D* решетки (z = 4) − . Приведем для примера выражения для функций  для квадратной решетки с учетом взаимодействия только ближайших соседей:

. (2.41)

Легко обобщить выражения (2.40) и (2.41) на прямоугольную решетку с периодами *a* и *b* по осям *х* и *у*:

, (2.42)

где  и  − интегралы перекрытия для б. с., расположенных соответственно вдоль осей *х* и *у*. Отметим, что такие структуры реализуются в адсорбированных слоях.

К чему же приводит увеличение размерности структуры? Как и в случае потенциальных ям, возникает возможность вырождения системы типа , где под  и  понимаются некоторые области (отнюдь не обязательно малые) -пространства.

Энергетическую плотность состояний можно найти по формулам типа (2.27), используя функции Грина вида

. (2.43)

К сожалению, для 2*D* случаев интеграл типа (2.27) точно не берется. Поэтому рассмотривается случай прямоугольной решетки, полагая :

 (2.44)

где  дается формулой вида (2.26). Отметим, что разложение (2.44) не является строгим, так как функция Грина  имеет полюса. Теперь необходимо найти

. (2.45)

Замечая, что интеграл по  от второго члена в квадратных скобках дает нуль, получим

, (2.46)

где  дается выражениями (2.29) и (2.30) с соответствующей заменой  на . Интеграл в правой части (2.46) можно вычислить с помощью интеграла (2.28). Перепишем (2.46) в виде

, (2.47)

где  и

. (2.48)

Исходя из интеграла,  и вводя параметр , получим

, (2.49)

где

, . (2.50)

Так как , , то , , или, переходя к параметру ,

, . (2.51)

Окончательно получаем

. (2.52)

где, напомним, . Перепишем (2.52) в виде

, (2.53)

где  и второе слагаемое в правой части записано для . В случае  имеем

. (2.54)

Тогда добавка к плотности состояний , задаваемой формулой (2.31) и возникающая из первого слагаемого в правой части (2.54), для области  есть

; (2.55)

для области  добавка . Таким образом, добавка положительна, и, следовательно, плотность состояний в 2*D* системе выше, чем в 1*D*. Покажем это на частных примерах.

В центре зоны (при ) имеем  и

. (2.56)

Как и ожидалось, поправка пропорциональна .

При  поправка (2.55) не работает, так как наше приближение справедливо лишь при , т. е.

. (2.57)

**2.5. Трехмерные системы с пространственным квантованием**

Рассмотрим квантово-размерную пленку, считая ее толщину  вдоль оси  малой, а протяженность вдоль осей  и  стремящейся к бесконечности. Тогда в направлении оси  имеет место пространственное квантование того же типа, что мы рассматривали в задаче об одномерной прямоугольной яме (п. 1.1). Следовательно, имеем

, (2.58)

, = 1, 2, 3, … . (2.59)

Отметим, что эффективная масса, входящая в выражение (2.58) есть  (рис. 2.1).

Если описывать электронные состояния, соответствующие движению электрона вдоль осей  и , в рамках модели почти свободных электронов, то будем иметь смешанный дискретно-непрерывный спектр вида

. (2.60)

Если же для характеристики электронных - и -состояний использовать метод сильной связи, то получим для прямоугольной 2D-решетки

. (2.61)

|  |
| --- |
| 2-1  *x*  *а*  0  0  *р*  *E*  *E*  *E*3  *E*2  *E*1 |
| Рис. 2.1. Энергетический спектр  квантово-размерной пленки ( − импульс  электронов в плоскости пленки, ) |

Главное различие между выражениями (2.60) и (2.61) заключается в том, что в (2.61) значение энергии  соответствуют дну *n*-ой зоны, тогда как в (2.61) − ее середине.

Определим теперь условия, при которых можно наблюдать размерные эффекты. Для этого, во-первых, необходимо, чтобы расстояние между соседними уровнями квантования  было бы достаточно большим, так, чтобы удовлетворялось неравенство, (2.62)

где  − постоянная Больцмана. Если же соотношение (2.62) не выполняется, то практически одинаковая заселенность соседних уровней и частые переходы между ними делают квантовые эффекты ненаблюдаемыми.

Если электронный газ вырожден и характеризуется химическим потенциалом  (отсчитываемым от дна зоны проводимости и равным при нулевой температуре энергии Ферми), то желательно также выполнение условия

. (2.63)

При невыполнении (2.63) многие квантовые состояния являются заполненными и квантово-размерные эффекты трудно наблюдать на фоне сплошного спектра. Отметим, что из условия (2.63) сразу же вытекает (2.62), так как .

Существует еще одно необходимое требование для наблюдения квантово-размерных эффектов. В реальных структурах носители всегда испытывают рассеяние. Интенсивность рассеяния обычно характеризуется временем релаксации импульса , которое связано с подвижностью носителей . Величина  представляет собой среднее время жизни в состоянии с данными фиксированными квантовыми числами (например, , ,  для двумерного электронного газа). В силу соотношения неопределенностей , ясно, что говорить о наличии в системе отдельных дискретных уровней можно лишь в случае, когда

. (2.64)

Можно показать, что выполнение условий (2.64) эквивалентно требованию того, чтобы длина свободного пробега носителей  значительно превосходила размер области , в которой имеет место пространственное квантование. Действительно, согласно квантовой механике, квантование возникает при периодическом движении частицы. Это происходит лишь в случае достаточно слабого рассеяния, когда частица между двумя актами рассеяния (т. е. пройдя путь ) успевает совершить несколько периодов колебаний, или, другими словами, несколько раз пересечь пленку (нить, точку) от границы до границы.

Поскольку расстояние между уровнями размерного квантования пропорционально , ясно, что для наблюдения квантовых размерных эффектов необходимы малые размеры структуры, достаточно низкие температуры и высокие подвижности носителей, а также не слишком высокая их концентрация.

Приведем некоторые оценки. Чтобы наблюдать квантовые размерные эффекты в полупроводниках с  ( − масса свободного электрона) при температурах вплоть до комнатной, необходимо иметь ≤ 10 нм. При этом подвижность носителей должна заметно превосходить 1000 см2 / (В∙с). Если изготовить столь малые структуры не представляется возможным, то наблюдение квантовых эффектов возможно лишь при пониженных температурах и более высоких подвижностях носителей.

Еще одним важным условием наблюдения квантовых эффектов является высокое качество поверхностей (или границ), ограничивающих движение носителей, характер отражения от которых должен быть близок к зеркальному, т. е. акт рассеяния на поверхности должен происходить с сохранением компоненты импульса, параллельной границе. Если это не так, то при каждом отражении от границы частица «забывает» о своем состоянии до отражения, т. е. на границе происходит эффективное рассеяние. Легко понять, что при этом длина пробега становится равной  и нарушается упомянутое выше условие .

**2.6. О плотностях состояний бесструктурных систем пониженной размерности**

К бесструктурным системам мы относим, например, тонкую пленку, рассмотренную в п. 2.5. Действительно, при ее рассмотрении мы игнорировали наличие кристаллической решетки. Другими словами, в таких системах рассматривается электронный газ. Для бесструктурных систем часто вводят плотность состояний  (*Е* – энергетическая переменная), которая отличается от определенной выше энергетической плотности состояний , определяемой мнимой частью соответствующей функции Грина. Так, например, для объемного образца с параболическим законом дисперсии возрастает с увеличением энергии  от края зоны как  (рис. 2.2, *а*) и имеет размерность (энергия·объем)-1, тогда как  вседа имеет размерность обратной энергии.

Начнем с нахождения плотности состояний  для спектра, изображенного на рис. 2.1. Для этого предварительно вычислим вспомогательную функцию − полное число состояний в интервале энергий от 0 до .

Очевидно, что при  функция . Рассмотрим область . Такие энергии могут иметь только электроны первого уровня, полный импульс которых . Эти электроны занимают в четырехмерном пространстве  объем (площадь), равный , где − размеры образца в плоскости двумерного электронного газа. На каждое состояние двумерного газа приходиться в фазовом пространстве элементарная площадь . Поэтому полное число состоний с энергией, меньшей *Е*, с учетом двукратного спинового выраждения дается формулой

. (2.65)



Рис. 2.2. Плотность состояний  для объемных полупроводников (*а*), квантовых ям (*б*), квантовых нитей (*г*) (,,− энергетические уровни размерного квантования в квантовых нитях и точках, лежащие выше уровней основного состояния  и .

Так как  определяют как число состояний на единицу площади, то

 при . (2.66)

При энергиях, больших , возможно существование электронов не только в первой, но и в вышележащих подзонах. Каждая подзона будет давать вклад в , такой же, как и (2.66). Поэтому плотность состояний будет испытывать скачки, равные , каждый раз, когда энергия электронов сравнивается с дном очередной подзоны . Это позволяет обобщить выражение (2.66) на случай произвольной энергии *Е*:

, (2.67)

где  − единичная функция Хевисайда, равная 1 при  и 0 при . На рис. 2.2, *б* приведен соответствующий график.

Аналогично можно найти плотность состояний для квантовых нитей со спектром

, (2.68)

где учтено, что в сечении *ху* энергия квантуется и принимает дискретные значения . В интервале энергий между низшим и следующим по энергии квантовым уровнем энергиям, меньшим, чем некоторое заданное *Е*, отвечает область импульсов . Соответствующий объем (длина) фазового пространства  равен , а элементарный объем на одно состояние составляет . С учетом спинового вырождения это дает

. (2.69)

Тогда имеем

. (2.70)

Эта функция, изображенная на рис. 2.2, *в*, имеет особенности (расходимости) при энергиях, соответствующих квантовым уровням в нити.

В случае квантовой точки, где энергетический спектр носит чисто дискретный характер,  увеличивается на единицу каждый раз, когда *Е* сравнивается с каким-либо квантовым уровнем (точнее говоря, скачок равен кратности вырождения уровня). При этом для одного уровня , так что

 (2.71)

(см. рис. 2.2, *г*).

**Задачи к гл. 2**

**2.1.** Исходя из уравнения Шредингера получить секулярное уравнение (2.3) и найти коэффициенты  и  (воспользоваться стандартным квантово-механическим подходом).

*Указание*. При нахождении значений коэффициентов  и  учесть, что .

**2.2.** Получить выражение (2.21).

**2.3.** Построить график энергетической плотности состояний (2.31) для однозонной модели линейной цепочки.

**2.4.** С учетом выражений (2.34) и (2.35) построить энергетическую диаграмму для двухзонной модели линейной цепочки.

*Указание.* Первоначально построить законы дисперсии для зон проводимости и валентной, а затем спроектировать края зон на ось энергий, получить полосы разрешенных и запрещенных состояний; определить энергии краев полос.

**2.5.** Воспользовавшись выражениями (2.39) и результатами задачи 2.3, построить закон дисперсии и энергетическую плотность состояний двухзонной модели линейной цепочки.

**2.6.** Используя уравнения Дайсона, найти функции Грина, энергетические уровни и локальные плотности состояний атомов в линейной эквидистантной трехатомной цепочке, построенной из одинаковых атомов с энергиями орбиталей  и связанных потенциалом .

**2.7.** То же, что и задача 2.6, но для атомов, расположенных в вершинах равностороннего треугольника и связанных друг с другом потенциалом . Проанализировать отличие полученных результатов от 2.6.

Тема семинара: «Методы расчета зонной структуры твердых тел»

**ГЛАВА 3. Особенности фононного спектра наносистем**

**3.1. Простейшие модели колебаний атомов в твердых телах**

Для простейшего описания колебаний атомов около их положений равновесия используется модель Эйнштейна, согласно которой каждый атом колеблется независимо от других подобно простому гармоническому осциллятору в потенциальной яме, образованной силами его взаимодействия с соседями. При этом спектр возбуждений кристалла состоит из эквидистантных уровней, расположенных на расстоянии  друг от друга, где  − эйнштейновская частота, т. е. частота осцилляций каждого атома в своей потенциальной яме. Плотность состояний для такой модели .

Модель Эйнштейна весьма груба и работает лишь при высоких температурах, когда предположение о независимости колебаний различных атомов оправдано. Сразу видно, однако, что если два или более атомов движутся в унисон, то силы между ними, стремящиеся возвратить эти атомы в положение равновесия, уменьшаются и, следовательно, квант энергии возбуждения будет несколько меньше. Существует тенденция к корреляции движений соседних атомов.

Так как в модели Эйнштейна рассматривается независимый осциллятор, то речи о волне, возбуждаемой в кристалле, не идет. Поэтому не встает вопрос о волновых векторах  и о дисперсии колебаний. Отсюда следует, что эйнштейновское описание значительно лучше подходит к оптическим фононам с малой дисперсией, нежели к акустическим фононам, испытывающим значительную дисперсию.

Для простейшего описания акустических фононов используется модель Дебая, которая строится на следующих предположениях.

1. Считается, что все акустические колебания характеризуются одинаковой скоростью звука *s*:

. (3.1)

1. Зону Бриллюэна заменют сферой. Это означает, что существует максимальная частота колебаний решетки – дебаевская частота , соответствующая радиусу этой сферы. Радиус сферы легко найти, замечая, что она должна содержать точно *N* точек при плотности их в *q*-пространстве, равной  (− объем кристалла). Соответственно, должно выполняться следующее равенство:

, (3.2)

где  – объем элементарной ячейки, откуда

, (3.3)

Тогда спектральная плотность состояний принимает вид

, (3.4)

где  есть дебаевская частота.

Модель Дебая хорошо работает при вычислении теплоемкости кристалла, давя при высоких температурах , где − температура Дебая, дает для теплоемкости закон Дюлонга – Пти , а при низких температурах  − кубическому закону .

Формула Дебая оправдывается для большинства твердых тел, а температура Дебая дает масштаб температуры: величина  представляет максимальный квант энергии, способный возбудить колебания решетки. Кроме того, температура Θ связана со средней скоростью звука *s* в кристалле соотношением .

Отметим, что обе рассмотренные нами простейшие модели колебаний в твердых телах бесструктурны. Чтобы понять свойства колебаний решетки, полезно изучить несколько простых, но учитывающих структуру системы случаев.

**3.2. Колебания одно- и двухатомных цепочек**

***3.2.1. Одноатомная цепочка***

Это пример одномерной решетки, в которой на каждую элементарную ячейку приходится один атом массы *М*, взаимодействующий лишь с ближайшими соседями с силовой константой α. С учетом того, что потенциальную энергию колебаний *V* можно представить как

, (3.5)

где *а* − постоянная решетки,  − смещение *l*-го атома. Уравнение движения  имеет вид

. (3.6)

Подстановкой  уравнение преобразуется к виду

. (3.7)

Полагая , получим

, (3.8)

где . Закон дисперсии колебаний представлен на рис. 3.1.

Исходя из классической механики, можно рассматривать найденную частоту просто как одну из собственных частот механической системы, обладающей дисперсией. С другой стороны, с точки зрения квантовой механики, мы можем ввести в рассмотрение квазичастицу – фонон, – обладающую энергией . Поэтому выражение (3.8) для  называется законом дисперсии фононов.

|  |
| --- |
| 4-1  ω*q*  0  π/*a*  -π/*a* |
| Рис. 3.1. Закон дисперсии фононов  в одноатомной цепочке |

Уже этот простой результат характеризует многие особенности теории колебаний решетки. Все возможные колебания можно получить, перебирая числа *q* из интервала . Этот интервал определяет зону Бриллюэнаодномерной решетки. Все значения *q*, лежащие вне указанного интервала, приводят просто к повторению уже известных движений. Как правило, изображают только правую половину рисунка, т. е. приведенную (или первую) зону Бриллюэна, и считают *q* положительным.

Всего имеется *N* различных решений, соответствующих *N* разрешенным значениям числа *q* в зоне Бриллюэна. Это согласуется с числом степеней свободы исходной решетки, равным *N*. Поясним сказанное.

Предположение о трансляционной симметрии решетки предполагает ее безграничность (но конечность!). Существует математический прием, состоящий в применении так называемых циклических граничных условий, или условий Борна-Кармана. В одномерном случае предполагают, что из цепочки, состоящей из *N* ячеек, можно образовать замкнутый круг. Тогда ячейки *l* и *Nl* совпадают, откуда следует, что , где *m* – целое число. Отсюда , и полное число состояний равно *N*. Именно здесь проявляет себя конечность решетки.

Для малых значений *q* (т. е. при *qа* << 1)

. (3.10)

Отсюда следует вывод, что если длина волны возмущения  гораздо больше постоянной решетки *а*, то цепочка атомов ведет себя подобно упругому стержню в классической механике (возмущение “не видит” мелкой атомной структуры цепочки). Групповая скорость распространения волны при этом совпадает со скоростью звука *s* в непрерывной среде. При больших *q*, однако, скорость волны не остается постоянной. При , когда длина волны равна 2*а*, функция  имеет горизонтальную касательную и групповая скорость обращается в нуль. В этом отклонении от линейности проявляется дисперсия колебаний решетки.

Найдем плотность состояний для колебаний одноатомной линейной цепочки . Число колебательных состояний в интервале энергий от  до  по определению равно . С другой стороны, плотность состояний в -пространстве есть , так что число состояний в интервале от  до , который соответствует энергетическому интервалу (,), есть. Приравнивая полученные для числа состояний выражения, найдем

. (3.11)

Отметим, что эйнштейновская частота  в цепочке определяется формулой

, (3.12)

которую легко понять, представив себе частицу массы , прикрепленную к неподвижным стенкам двумя пружинками с константой жесткости  каждая, и сообразив, что при смещении частицы из положения равновесия деформации обеих «пружинок» (правой и левой) вызывают одинаковые силы, направленные к положению равновесия, что можно учесть, удвоив константу жесткости . Таким образом, .

***3.2.2. Двухатомная цепочка***

Рассмотрим линейную цепочку атомов, расположенных на одном и том же расстоянии друг от друга, с такими же силовыми постоянными, как и прежде, но с двумя различными чередующимися массами  и . Теперь каждая элементарная ячейка содержит два атома. Уравнения движения имеют несколько более сложный вид, чем в предыдущем случае:

 (3.13)

Решение этой системы уравнений имеет вид:

 (3.14)

где *М* – приведенная масса. Зависимость частот от волнового вектора приведена на рис. 3.2.

|  |
| --- |
| 4-2  Оптическая ветвь  Акустическая ветвь  π/2*a*  -π/2*a*  0  ω  ω–  ω+ |
| Рис. 3.2. Закон дисперсии  фононов в двухатомной цепочке |

Как и в случае одноатомной цепочки, имеется корень , который вблизи точки *q* = 0 становится пропорциональным *q*. Соответствующее колебание называется акустическим, так как оно аналогично длинноволновому колебанию цепочки, рассматриваемой как упругий континуум. Аналогично, фононы, отвечающие ветви , называются акустическими фононами. Есть, однако, еще ветвь . Вблизи *q* = 0 соответствующая частота есть

. (3.15)

Такое колебание называется оптическим (оптические фононы). При *q* = 0 подрешетки легких и тяжелых атомов движутся без деформации в противоположных направлениях. Иначе говоря, двухатомная “молекула” в каждой ячейке колеблется так, как если бы она была независима от своих соседей. Отметим, что дисперсия оптических ветвей гораздо меньше, чем акустических. Укажем также, что частота  совпадает с эйнштейновской частотой атома массы .

Подход к решению и результаты рассмотренной задачи о двухатомной линейной цепочки могут быть использованы при рассмотрении колебаний сверхрешеток. Так, например, в соединениях с кристаллической решеткой типа цинковой обманки в плоскостях, перпендикулярных направлению [100], содержатся атомы одного сорта. Поэтому для колебаний, распространяющихся в направлении [100], смещения атомов в плоскостях одинаковы, и задача может быть сведена к одномерному случаю.

В трехмерных кристаллах картина колебаний усложняется. Если примитивная ячейка кристалла содержит *р* атомов, то в дисперсионном законе для фононов возникают 3 акустических и (3*p*-3) оптических ветвей. Так, у алмаза, содержащего в примитивной ячейке два атома углерода, имеется шесть фононных ветвей: по одному продольному колебанию *LA* (акустическому) и *LO* (оптическому) и по два (соответствующих разным поляризациям) поперечных колебания *TA* и *TO*.

**3.3. Изотопический дефект в одноатомной линейной цепочке**

Для того чтобы понять, как возникают локальные колебания, рассмотрим задачу об изотопическом дефекте. Точнее, рассмотрим примесь замещения в одноатомной линейной цепочке атомов с массами , которая не изменяет локальные силовые константы , но имеет массу . По сути, это аналог рассмотренной нами задачи Костера-Слэтера.

Пусть этот изотопический атом находится в узле . Тогда мы можем написать следующую систему уравнений:

, ,

, ,

,

и т. д. С помощью проверки можно убедиться, что решения этой системы урравнений можно записать в виде

. (3.16)

При этом должны выполняться два условия

, (3.17)

, (3.18)

что дает для  решение

, (3.19)

где  есть максимальная частота колебаний одноатомной цепочки (3.8) и

. (3.20)

Очевидно, что когда  существует значение , которое лежит выше максимальной частоты идеального кристалла . Свойства этого нового собственного состояния можно проанализировать путем решения (3.17) и (3.18) для  с использованием выражения (3.19). Это дает

. (3.21)

При величина  всегда меньше 1, что позволяет нам переписать выражение (3.16) в форме

. (3.22)

Так как величина  отрицательна, смещения атомов затухают экспоненциально при удалении от дефекта. При этом затухание тем больше, чем меньше отношение . Это называется локальной модой колебаний*.* Такая мода полностью аналогична электронным локальным состояниям примеси. Другие типы примесных колебаний возможны в двухатомном кристалле с двумя атомами разного сорта в примитивной ячейке.

Здесь возможны промежуточные колебания, частоты которых лежат в интервале между акустическими и оптическими ветвями. Тяжелые примеси могут приводить к квазилокализованным резонансным колебаниям, чьи частоты лежат в области разрешенных фононных частот идеального кристалла. Такие колебания примесного атома характеризуются сильно увеличивающейся амплитудой (рис. 3.3).

|  |
| --- |
| Локальное колебание  Промежуточное колебание  Резонансное колебание |
| Рис. 3.3. Амплитуда колебаний частиц, связанные с локальными (*а*), промежуточными (лежащими внутри щели между акустическими и оптическими фононами) (*б*) и  резонансными (*в*) видами колебаний в кристалле с двумя атомами на  примитивную ячейку. Светлым кружком обозначен примесный атом. |

**3.4. Вакансия в одноатомной линейной цепочке**

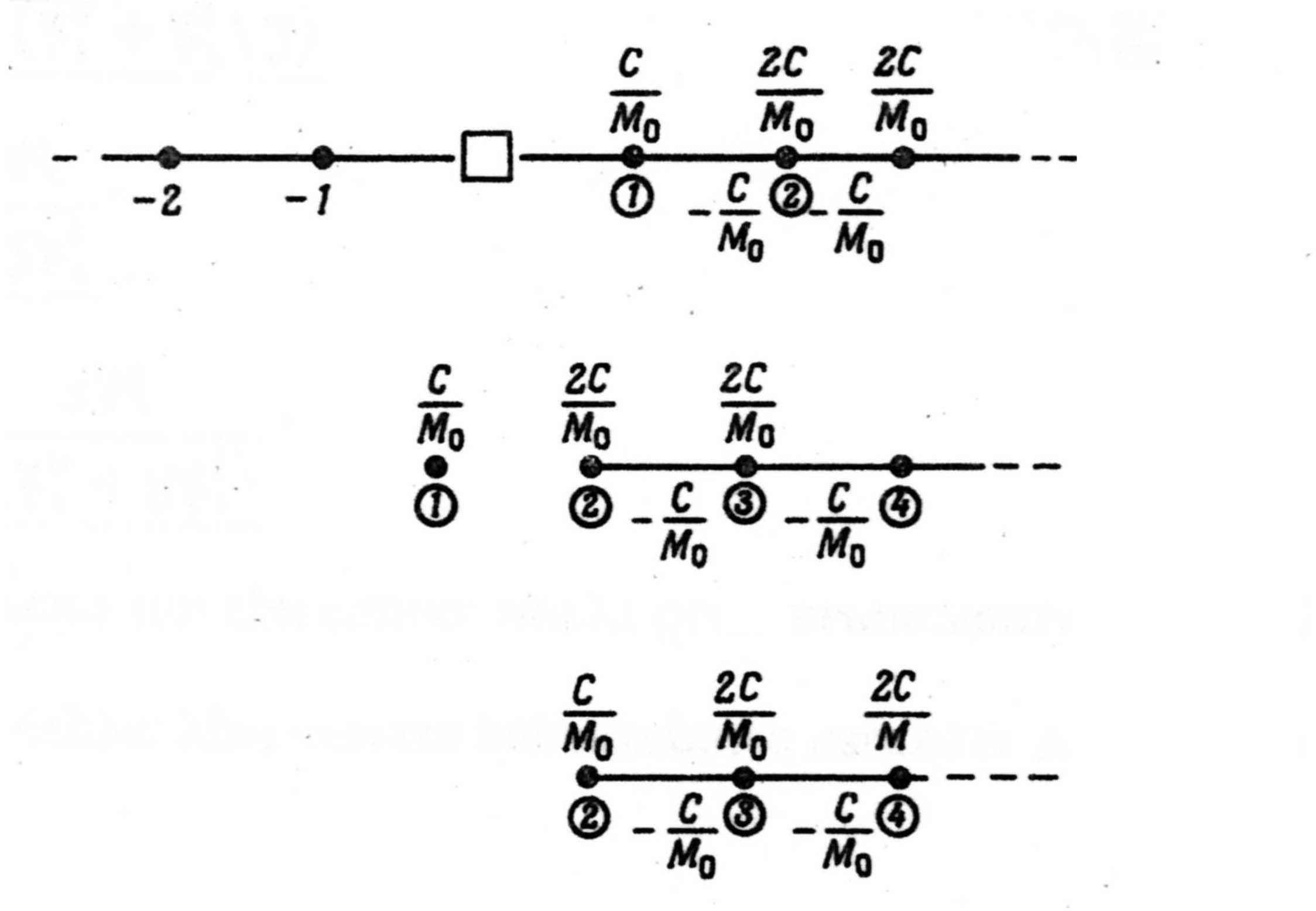
Обратимся вновь к п. 3.1 и, используя модель Эйнштейна, введем невозмущенную функцию Грина одноатомной линейной цепочки в виде

, (3.23)

где индексы символа Кронекера нумеруют атомы цепочки. Здесь имеется аналогия с функцией Грина для электронных состояний. Действительно, аналогом гамильтониана для электронной подсистемы является динамическая матрица  для фононной подсистемы, которая в данном простом случае сводиться к силовой константе . Если собственными значениями электронного гамильтониана являются собственные энергии уровней , а функции Грина имеют вид  (п. 2.2), то собственными значениями динамической матрицы являются квадраты частоты, умноженные на . Отсюда и получаем выражение (3.23). Аналогично, для функции Грина изотопа в приближении Эйнштейна можно записать

. (3.24)

Необходимо, однако, отметить, что определение фононной функции Грина в виде (3.23), (3.24) не является единственным. Иногда, например, функцию Грина представляют в виде . Поэтому при нахождении плотности состояний фононной системы необходимо быть внимательным (см. ниже).



Модель *b*

Модель *c*

Модель *a*

Рис. 3.4. Бесконечная линейная цепочка, содержащая вакансию, эквивалентна   
двум полубесконечным линейным цепочкам (здесь , ).

Рассмотрим простую модель вакансии (рис. 3.4, модель *а*). Когда на узле 0 создается вакансия, задача превращается в задачу о двух независимых полубесконечных цепочках. Мы рассмотрим только правую часть цепочки, для чего воспользуемся методом функций Грина.

Для нахождения функции Грина  цепочки, возмущенной вакансией, воспользуемся уравнением Дайсона

, (3.25)

где  − потенциал возмущения. Рассмотрим для начала модель *b* (рис. 3.4). Будем считать, что такая модель описывается функцией Грина . Затем вычислим , т. е. функцию Грина конечного («поверхностного») атома 1 полубесконечной цепочки (модель *а*). Возмущением  при переходе от модели *а* к модели *b* является выключение связи  между узлами 1 и 2 (см. рис. 3.4). Тогда

 (3.26)

и

. (3.27)

Здесь функция  относится к атому 1 модели *b* (рис. 3.4) и выступает в качестве невозмущенной функции Грина в уравнении Дайсона (3.25). Вообще все функции с индексом *b* (например, ) являются в этом смысле невозмущенными.

Это приводит к соотношению

, (3.28)

или

. (3.29)

Мы можем проделать то же самое для величины , рассматривая модель *с* (рис. 3.4) в качестве новой невозмущенной задачи; в результате получаем

, (3.30)

или

, (3.31)

где, как следует из рис. 3.4, (матричный элемент  «делает» из функции Грина  фукцию Грина − см. верхние обозначения на моделях *а*-*с* рис. 3.4). Тогда

. (3.32)

Прямое сравнение функций Грина  и  показывает, что они должны быть равны, так как соответствующие им физические ситуации идентичны. Мы можем написать, используя (3.29) и (3.32):

. (3.33)

Это квадратное уравнение относительно функции Грина ; его решение (с учетом того, что ) имеет вид

. (3.34)

Плотность состояний  будем вычислять по формуле . Дополнительный множитель  введем здесь для того, чтобы плотность состояний была пропорциональна обратной частоте (аналога обратной энергии для электронной плотности состояний). Тогда внутри зоны (), где имеются ненулевые значения , плотность состояний принимает вид

. (3.35)

|  |
| --- |
| 4-5  ω2*M*  (*na*)11  ω2  ω2  ω2*M*  ω  *а б* |
| Рис. 3.5. Сравнение плотностей состояний для двух случаев: *а* − идеальной линейной  цепочки (); *б* − линейная цепочка, содержащая вакансию (); . |

Плотность состояний (рис. 3.5) приведена для сравнения с плотностью состояний  в идеальной цепочке (см. (3.11)), где

2/π

.

Рисунок показывает, что в окрестности вакансии в среднем частоты колебательных мод понижаются. Заметим также, что здесь отсутствуют локальные моды. Все это можно легко понять с помощью модели Эйнштейна. Устранение сил, действующих между центральным атомом и его соседями, приводит к уменьшению диагональных матричных элементов, пропорциональных  членов, соответствующих этим атомам (см. верхние обозначения на моделях *а*-*с* (рис. 3.4), и, следовательно, к уменьшению их частот. Данный вывод можно распространить и на более сложные случаи.

**3.5. Интерфейсные фононы в полярных кристаллах**

|  |
| --- |
|  |
| Рис. 3.6. Граница раздела двух  материалов с разными  диэлектрическими проницаемостями. |

Рассмотрим явления, связанные с распространением колебаний вдоль границы раздела двух сред с диэлектрическими проницаемостями  и  (рис. 3.6). Пусть слой 1 занимает верхнюю полуплоскость, а слой 2 − нижнюю, и в материалах слоев присутствует ионный тип связи.

Распространение упругих колебаний в таких материалах будет создавать поляризацию  и электрическое поле , изменяющиеся периодически во времени и в пространстве по тому же закону, что и смещение атомов. Таким образом, в кристалле возникает электромагнитное поле, связанное с упругими волнами.

Для изотропного материала согласно уравнению Максвелла имеем

, (3.36)

где  − электрическое смещение,  − электрический потенциал,  − статическая диэлектрическая проницаемость. Таким образом, электрический потенциал должен удовлетворять уравнению

. (3.37)

Переписав уравнение (3.36) таким образом, мы сразу же дали понять, что могут существовать два решения:  и .

Зависимость диэлектрической проницаемости от частоты в полярных кристаллах может быть представлена в виде

. (3.38)

Здесь  и  − частоты длинноволновых () продольных и поперечных оптических колебаний,  − параметр затухания,  − высокочастотная диэлектрическая проницаемость. Формула (3.32) при = 0 называется соотношением Лиддана – Сакса – Теллера:

, (3.39)

откуда следует, что частоты продольных и поперечных оптических фононов при  являются нулями и полюсами диэлектрической функции . Из (3.39) также следует, что в области частот  электромагнитные волны в объемных кристаллах распространяться не могут.

|  |
| --- |
| 4-7  ε*∞*  ε*S*  ε*0*  ω  ω*LО*  ω*ТО* |
| Рис. 3.7. Зависимость  диэлектрической проницаемости от частоты в полярных кристаллах. |

Зависимость (3.39) схематически изображена на рис. 3.7. Видно, что в соответствии с (3.37) в полярных кристаллах возможно существование электрических колебаний с  и .

Другой тип решения (3.37) с  в случае изотропной модели можно представить в виде

, (3.40)

где  − волновой вектор фонона в произвольном направлении , параллельном границе раздела. Подставляя (3.40) в (3.37), придем к уравнению  
, (3.41)

решение которого есть

 (3.42)

Таким образом,

, (3.43)

где знак  относится соответственно к  и .

Согласно (3.43) данный тип колебаний оказывается локализованным около границы раздела. Такие колебательные моды могут распространяться вдоль границы раздела, экспоненциально затухая в контактирующих средах. Следует отметить, что глубина проникновения колебательных возбуждений в контактирующие среды определяется волновым вектором  (т. е. длиной волны ). При этом короткие волны будут затухать быстрее, чем длинные.

Используя условия непрерывности  и  на границе раздела, получим, что , т. е. амплитуда колебаний потенциала в слоях по обе стороны границы раздела будет одинаковой, и что интерфейсные колебания могут возникать, если

. (3.44)

Анализируя зависимость диэлектрической проницаемости от частоты (3.39), замечаем, что условие (3.44) может выполняться как минимум в двух случаях: а) на границе раздела полярный кристалл-вакуум (для вакуума  
= 1); б) на границе раздела двух полярных кристаллов.

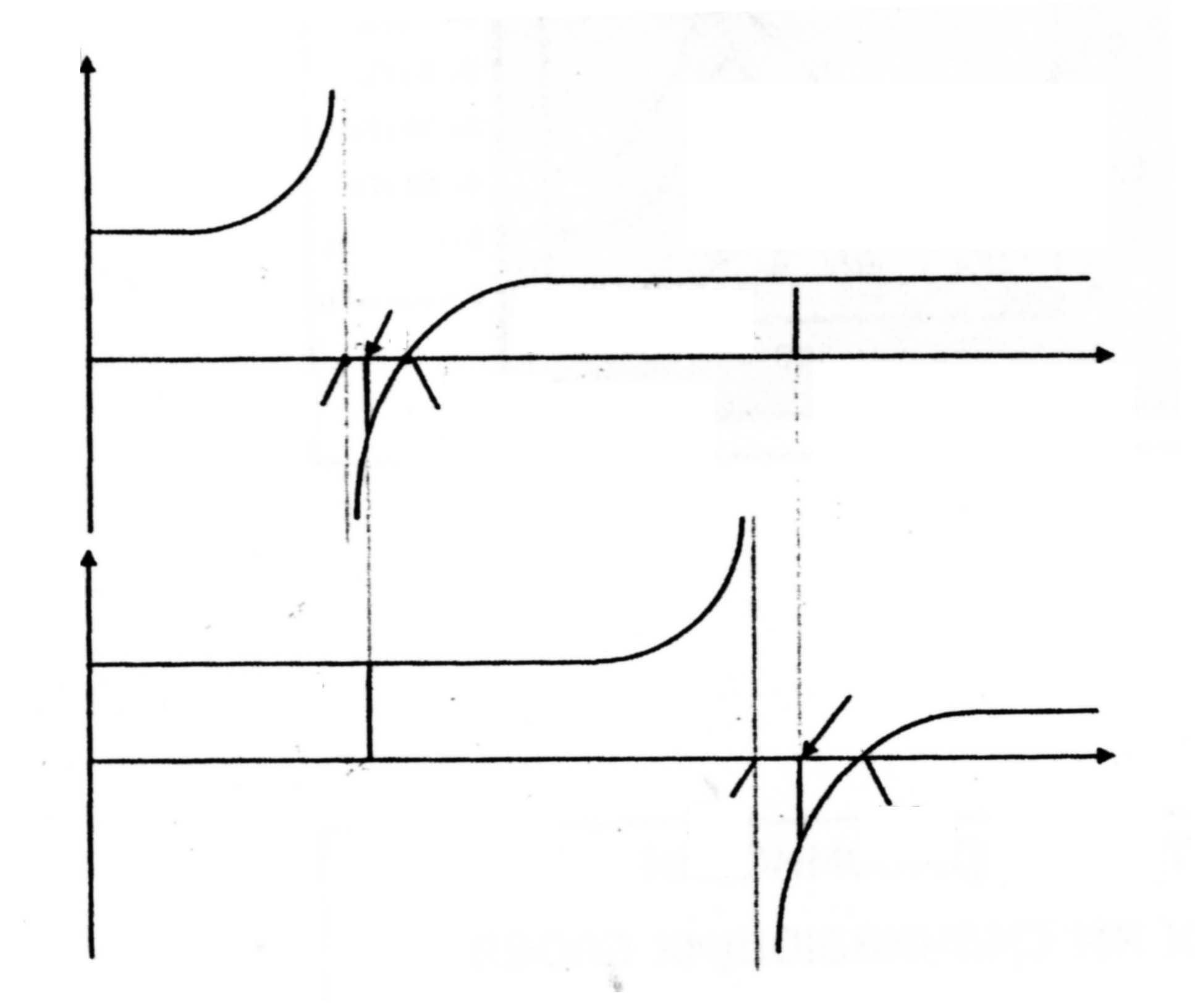
На границе раздела полярный кристалл – вакуум условие (3.44) принимает вид  (для кристалла). Этому условию будет удовлетворять волна с частотой  (рис. 3.8). Таким образом, вдоль границы полярный кристалл – вакуум возможно распространение бегущей волны, или поверхностного фонона.

|  |
| --- |
| 4-8  ε*0*  ε*S*  -1  0  ω  ωпов  ω*LО*  ω*ТО* |
| Рис. 3.8. Зависимость  диэлектрической проницаемости от частоты. |

Для анализа особенностей распространения бегущих волн вдоль границы раздела двух полярных кристаллов необходимо сопоставить зависимости  для контактирующих материалов. На рис. 3.9 представлены зависимости  для GaAs и AlAs. Согласно этому рисунку условие (3.44) в данном случае будет удовлетворяться для двух мод колебаний с частотами  и . Таким образом, вдоль гетерограницы GaAs/AlAs возможно распространение двух типов колебаний, или двух интерфейсных фононов.

????????????????????????????????????????????????????????????

|  |
| --- |
| ε0  ε(1)*S*  ε(2)*S*  405  360  295  270  ω(1)*IF*  ω(2)*IF*  GaAs  AlAs  ω, см-1  ω, см-1 |
| Рис. 3.9. Зависимость  для GaAs  и AlAs |



**Задачи к гл. 3**

**3.1.** Вычислить частоту колебаний атомов двухатомной молекулы массой , взаимодействие которых описывается потенциалом Морса:

,

где − равновесное межатомное расстояние,  − энергия диссоциации молекулы. Какова будет эйнштейновская частота ?

*Указание*. Силовая константа .

**3.2.** Воспользовавшись выражением (3.14) для частот двухатомной цепочки, определить значения оптической и акустической частот на границе зоны Бриллюэна. Сравнить полученные значения с максимальной частотой  для одноатомной цепочки и с эйнштейновской частотой. Определить интервалы разрешенных и запрещенных колебаний.

**3.3.** Рассмотреть решение уравнений движения для цепочки (см. учеб. пособие, формулы (3.13)), состоящей из ионов двух сортов с зарядами , при наличии действующего вдоль цепочки электрического длинноволнового поля с напряженностью . Найти разность амплитуд .

*Указание*. Считать, что атом 1 обладает зарядом , атом 2 – зарядом .

Следовательно, на атом 1 действует сила , на атом 2 – сила .

**3.4.** Получить формулы (3.17) − (3.19) и (3.21). Проанализировать случаи , .

**3.5.** Воспользовавшись результатами задачи 3.2 и выражениями (3.19) и (3.20), получить значения параметра , отношения и значения параметра , отвечающие попаданию частоты , определяемой выражением (3.19), в области акустических и оптических колебаний и в область щели. Учесть при этом результаты задачи 3.4.

*Указание*. Отдельно рассмотреть случаи и .

**3.6.** Воспользовавшись выражением (3.32), получить формулы (3.33) и (3.34).

**3.7.** Воспользовавшись равенством (3.44) и выражением (3.39), найти частоту фонона , распространяющегося по поверхности полярного кристалла на границе с вакуумом.

Тема семинара: «Оптические свойства в инфракрасной области спектра. Поляритоны».

**ГЛАВА 4. Туннелирование через квантово-размерные  
 структуры**

**4.1. Коэффициент прохождения**

Рассмотрим движение частицы в поле (рис. 4.1) потенциала типа:  монотонно возрастает от одного постоянного предела ( при ) до другого ( при ). Согласно классической механике частица с энергией , движущаяся в таком поле слева направо, дойдя до потенциальной стенки, отражается от нее, начиная двигаться в обратном направлении. Если же , то частица продолжает двигаться в прежнем направлении с уменьшенной скоростью. В квантовой механике возникает новое явление − даже при  частица может отразиться от потенциальной стенки. Вероятность отражения должна вычисляться следующим образом.

|  |
| --- |
| *U*0  *U*(*x*)  *x* |
| Рис. 4.1. Потенциал, в  котором движется частица. |

Пусть частица движется слева направо. При больших положительных значениях  волновая функция должна описывать частицу, прошедшую над стенкой и движущуюся в положительном направлении оси , т. е. должна иметь асимптотический вид: при  имеем

, , (4.1)

где *А* − постоянная. Найдя решение уравнения Шредингера, удовлетворяющее этому предельному условию, вычисляем асимптотическое выражение при . Оно является линейной комбинацией двух решений уравнения свободного движения: при  имеем ,

. (4.2)

Первый член соответствует падающей на стенку частице с единичной амплитудой; второй изображает отраженную от стенки частицу. Плотность потока частицы

 (4.3)

в падающей волне пропорционален , в отраженной − , а в прошедшей − . Определим коэффициент прохождения частицы  как отношение плотности потока в прошедшей волне к плотности потока в падающей:

. (4.4)

Аналогично можно определить коэффициент отражения  как отношение плотности отраженного потока к падающему; очевидно, что :

. (4.5)

Если частица движется слева направо с энергией , то  чисто мнимо и волновая функция экспоненциально затухает при . Отраженный поток равен падающему, т. е. происходит полное отражение частицы от потенциальной стенки. Подчеркнем, однако, что и в этом случае вероятность нахождения частицы в области, где , все же отлична от нуля, хотя и быстро затухает с увеличением .

Вообще говоря, задача о прохождении частицы сквозь барьер решается стандартными методами квантовой механики: для каждой из трех сред записываются волновые функции, потом на границах сред сшивают сами эти функции и их производные, что дает возможность определить весовые коэффициенты вкладов отдельных компонент в эти функции. Дело это, однако, довольно хлопотное даже, казалось бы, в простейших случаях.

Рассмотрим, например, прямоугольный барьер высотой  и шириной , т.е.  при  и  во всех остальных случаях. Слева от барьера волновая функция может быть представлена в виде , в области барьера имеем  и, наконец, справа от барьера волновая функция , где ,  при  и  при . Наличие двух границ дает четыре уравнения для определения четырех неизвестных коэффициентов. После весьма утомительной алгебры получим

. (4.6)

Интересно отметить, что  при  (высокоэнергетическая частица не замечает барьера) и  при . Так выглядит ситуация для простейшего барьера. Ясно, что для более сложного барьера (даже при его кусочно-линейной аппроксимации) придется сталкиваться с большими трудностями.

Рассмотрим, однако, ситуацию, когда де-бройлевская длина волны частицы , где −импульс частицы, мала по сравнению с характерным размером изменения потенциала , т.е. потенциал на масштабе  меняется мало (рис. 4.2).



Рис. 4.2. «Гладкий» барьер.

Для такой ситуации было разработано так называемое квзиклассическое приближение, в рамках которого коэффициент прохождения такой структуры с экспоненциальной точностью может быть оценен выражением

. (4.7)

Ясно, что такое приближение весьма полезно при рассмотрении потенциальных барьеров, моделирующих реальные ситуации.

**4.2. Двухбарьерные структуры**

Современные технологические методы позволяют создать гетероструктуры с толщиной 1÷ 10 нм. Эта толщина может быть сравнима с длиной волны де Бройля электронов и дырок, поэтому в таких структурах может проявляться волновая природа носителей заряда, в частности открывается возможность резонансного туннелирования электронов через систему ям и барьеров.

|  |
| --- |
| 5-2  *E*  *U*  *U*2  *U*1  *z*  *a*1+ *a*2+*L*  *a*1+*L*  *a*1  0 |
| Рис. 4.3. Двухбарьерная квантовая структура |

Пусть на двухбарьерную структуру (рис. 4.3) в положительном направлении оси  падают электроны с энергией  и импульсом .

Найдем амплитуды отражения  и прохождения  (, , где  и  по-прежнему обозначают коэффициенты отражения и прохождения), не решая уравнение Шредингера, а рассматривая многократные отражения волн от барьеров. Амплитуды отражения  и прохождения  для первого и второго барьеров соответственно считаем известными. Учитывая, что фазовый набег электронной волны при распространении от одного барьера до другого равен , и суммируя получающиеся геометрические прогрессии, можно написать



.

Обозначим , тогда коэффициент прохождения

. (4.8)

Если импульс падающих частиц удовлетворяет условию

,  (4.9)

то их коэффициент прохождения

. (4.10)

Подчеркнем, что  зависят от , причем, как можно показать, в интересующем нас случае туннелирования через прямоугольные барьеры .

Будем считать барьеры достаточно толстыми. В этом случае амплитуды прохождения  и  экспоненциально малы (, где ), а амплитуды отражения близки по модулю к единице:

. (4.11)

Подставляя это выражение в (4.10), получим

, (4.12)

где . В частности, при  имеем . Это и есть *эффект резонансного туннелирования*. Поскольку число частиц при рассеянии на барьере сохраняется, то .

Итак, хотя проницаемости барьеров малы (), при некоторых значениях энергии частица не чувствует барьеров. Механизм резонансного туннелирования таков: из-за интерференции электронных волн при их отражении от барьеров снаружи остаются лишь падающая и прошедшая волны, а обратная (отраженная) волна полностью гасится.

Полезно найти волновую функцию электрона в яме между барьерами. Она имеет вид

 (4.13)

где

 (4.14)

Здесь амплитуда падающей волны считается равной 1. Из формул (4.14) видно, что при  .

Полагая , получаем . Таким образом, амплитуда волновой функции внутри ямы значительно больше, чем вне барьерной структуры. На языке классической механики можно сказать, что электрон задерживается в яме на большой промежуток времени и многократно рассеивается на барьерах, вследствие чего многократно возрастает вероятность его туннелирования из ямы.

Отметим одно довольно важное обстоятельство. После формулы (4.12) приведены значения уровней энергии в пространстве между барьерами в виде . Но нужно отдавать себе отчет, что если электрон обладает вероятностью выхода частицы из межбаръерной ямы, то энергия уровней должна быть комплексной величиной, т.е. вместо  мы должны иметь . Мнимую часть энергии уровня можно сопоставить с его полушириной , которую, в свою очередь, можно найти из соотношение неопределенности . Таким образом, вместо энергии  будем окончательно иметь , где мы формально положили . С учетом этого обстоятельства, после достаточно громоздкой, хотя принципиально и не сложной алгебры можно прийти к выражению

. (4.15)

Так как появившийся энергетический множитель не превышает единицы, ясно, что в общем случае и .

Пространственные флуктуации толщины или состава барьерных слов приводят к тому, что на различных участках двухбарьерной структуры энергии резонансных уровней различны, что в свою очередь уменьшает полный резонансный ток частиц с заданной энергией. Поэтому требование высокой степени идентичности и однородности барьерных слоев является существенным при изготовлении резонансных туннельных гетероструктур и приборов на их основе. В качестве последнотметим резонансно-туннельные диоды.

**4.3. Кулоновская блокада туннелирования**

***4.3.1. Общие соотношения***

В конце 60-х − начале 70-х годов прошлого века были выполнены эксперименты с туннельными контактами типа «металл − оксидный слой − металл», причем оксидный слой содержал металлические вкрапления − гранулы. Гранулы считались удаленными друг от друга настолько, что их можно было рассматривать как невзаимодействующие. Туннелирование электронов через каждую гранулу происходило независимым образом. Поэтому при расчетах достаточно было рассмотреть туннелирование через одну гранулу, а потом усреднить результат по параметрам и местоположению гранул.

Оказалось, что при низких температурах такие контакты обладают своеобразными вольт-амперными характеристиками (рис. 4.4). В частности, наблюдалось подавление тока при малых напряжениях.



Рис. 4.4. Вольт-амперная характеристика структуры при наличии кулоновской блокады.

Такое подавление можно объяснить следующим образом. Туннелирующий электрон, оказавшись на грануле, изменяет ее заряд на величину , повышая тем самым энергию гранулы на

, (4.16)

где  − емкость гранулы (потенциальная энергия заряда , помещенного на объект с емкостью , равна ). Чтобы новый электрон мог туннелировать с контакта на гранулу, его энергия должна превышать . При низких температурах таких электронов мало, что приводит к подавлению тока. Это явление получило название кулоновской блокады туннелирования. Преодолеть такую блокаду можно только при сравнительно высоких напряжениях .

В конце 80-х годов были созданы микроконтакты, в которых туннелирование происходит преимущественно через одну гранулу. Были также предложены устройства, в которых зарядом гранулы можно управлять, прикладывая напряжение к дополнительному электроду − затвору. Такие эксперименты стимулировали исследования коррелированного дискретного туннелирования одиночных электронов. В данном разделе мы ознакомимся с основами теории этого явления.

Подчеркнем, что речь идет о гранулах (в последнее время чаще говорят о «точках»), размеры которых достаточно велики, чтобы не учитывать пространственное квантование, но достаточно малы, чтобы можно было рассматривать дискретность заряда гранулы. То, что такая ситуация возможна, показывают следующие оценки.

Характерная электростатическая энергия гранулы, на которую перешел «внешний» («посторонний») электрон, есть

, (4.17)

где  − радиус гранулы, − статическая диэлектрическая проницаемость окружающей гранулу среды. Это выражение совпадает с (4.16), так как в системе СГСЭ емкость шара .

С другой стороны, расстояние между энергетическими уровнями электронов гранулы

, (4.18)

где  − число собственных электронов на грануле с межатомным расстоянием (имеются в виду металлы с одним валентным электроном),  − энергия Ферми металлической гранулы. Отметим, что в металлах . (Не следует путать энергию Ферми и уровень Ферми; последний можно отсчитывать от какого угодно энергетического уровня, принятого за нуль энергии, тогда как энергия Ферми  имеет абсолютный смысл: на энергетической диаграмме металла она равна энергетическому промежутку от дна зоны проводимости до последнего занятого (при *Т* = 0) уровня). Тогда

. (4.19)

Отсюда видно, что при имеем , т. е. учет дискретности заряда (т. е. увеличения энергии гранулы при приходе на нее дополнительного заряда) существеннее учета пространственного квантования спектра электронов гранулы (связанного с расстояниями между соседними уровнями). В то же время для проявления дискретности заряда гранулы необходимо, чтобы выполнялось условие . Это условие можно переписать в виде

. (4.20)

При заданной температуре это условие ограничивает размеры гранулы сверху. Отметим, что в экспериментах диаметр гранулы составляет величину порядка 103 Å.

***4.3.2. Потенциальная энергия гранулы***

Рассмотрим туннельный контакт (рис. 4.5) и соответствующую такому контакту эквивалентную схему (рис. 4.6). Будем считать, что металлы *1* и *2* (иногда их называют берегами контакта) и гранула имеют одинаковые работы выхода. Тогда в отсутствии внешних напряжений электроны не будут перераспределяться между гранулой и берегами.

|  |  |
| --- | --- |
| 5-3  2  1  3 | 5-4  *R*1  *-q*1, *q*1  *C*2  *R*2  *C*1  *q*2,*-q*2  *V*1  *V*2 |
| Рис. 4.5. Схематическое  изображение туннельного контакта | Рис. 4.6. Эквивалентная схема  туннельного контакта |

Обозначим заряды, сосредоточенные на емкостях , , соответственно ,  (здесь нижние индексы 1 и 2 относятся к левому и правому туннельным переходам). Полный заряд гранулы

. (4.21)

Из эквивалентной схемы (рис. 4.6) следует, что

, (4.22)

где  − потенциал гранулы (точки). Из выражений (4.21) и (4.22) получим

, (4.23)

где  − эффективная емкость гранулы. При изменении заряда гранулы на  ее потенциальная энергия  увеличивается на . Элементарное интегрирование по  дает

. (4.24)

Выражая заряд гранулы через число перешедших на нее избыточных электронов  и вводя обозначение , получим

 (4.25)

В нулевом приближении по напряжению, т. е. в предположении , вероятность  того, что на грануле находится  избыточных электронов, может быть представлена распределением Гиббса:

. (4.26)

Здесь учтено, что число  может быть отрицательным (в случае ухода электронов с гранулы).

Графическое изображение зависимости энергии  от числа  − это набор точек, лежащих на параболе (4.25) и имеющих целочисленные абсциссы, причем абсцисса вершины параболы равна (рис. 4.7). ????????????????

*–*1

*n*

*R*2

–ξ

ε0*n*

*–*2

*–*1

*–*3

*n*

–ξ

ε0*n*



|  |
| --- |
| 5-5 |
| *а б*  Рис. 4.7. Зависимость эффективной потенциальной энергии гранулы (показана точками) от числа избыточных при полуцелом (*а*) и неполуцелом (*б*) значениях параметра . |

Легко видеть, что минимум потенциальной энергии гранулы достигается при , т.е. не при избытке, а при недостатке электронов на ней.

При низких температурах () в соответствии с распределением Гиббса система может находиться практически лишь в одном состоянии − состоянии с наименьшей энергией. Если  − полуцелое число (, = 0, 1, 2, …), то ближайшие к вершине параболы точки имеют абсциссы ,  и соответствуют одной и той же энергии (рис. 4.7, *а*). Следовательно, низшее энергетическое состояние гранулы двукратно вырождено по числу избыточных электронов. Это число может меняться на единицу, не требуя затрат энергии.

В общем случае среднее значение избыточных электронов на грануле  при  определяется по общему правилу:

. (4.27)

Так как, по предположению, температура очень мала (), величина  является просто средним арифметическим значений  и , так что , а отклонение числа избыточных электронов от среднего значения по модулю равно 1/2. Таким образом, туннелирование через гранулу, сопровождающееся изменением числа электронов на грануле на единицу (например, сначала увеличением этого числа, затем его уменьшением или наоборот), не требует затрат энергии и может протекать эффективно.

Если же параметр  отличен от полуцелого числа, низшее энергетическое состояние гранулы не вырождено и соответствует одному значению  (рис. 4.7, б). И флуктуации числа электронов на грануле, и туннелирование электронов через нее, также сопровождающееся изменением числа , требует конечной энергии, т. е. имеет активационный характер. Эти процессы могут быть осуществлены только электронами с достаточно большой энергией, а таких электронов при низких температурах практически нет. Поэтому, когда  не полуцелое число, как флуктуации числа электронов на грануле, так и туннелирование через нее невозможны.

***4.3.3. Вольт-амперная характеристика***

Будем для определенности считать, что потенциал левого берега туннельного контакта выше потенциала правого берега, т.е. , причем напряжение достаточно велико, так что выполняется условие . Температуру считаем низкой: , откуда .

Если бы не надо было учитывать потенциальную энергию гранулы, то вследствие того, что уровень Ферми в металле 2 значительно выше, чем в грануле, ток через переход «гранула – металл 2» определялся бы в основном потоком электронов из металла 2 в гранулу и был бы пропорционален .

При туннелировании электрона эффективная потенциальная энергия гранулы изменяется на величину, не превосходящую , что меньше . Следовательно, и при учете дискретности заряда гранулы ток «металл 2 – гранула» растет с , но прямая пропорциональность уже нарушается. Причина этого заключается в следующем. При низких температурах гранула может находиться практически лишь в наинизшем энергетическом состоянии (см. рис. 4.7, где, учитывая наличие потенциала , нужно заменить  на  и  на ). При  гранула будет находиться в состоянии с  и при туннелировании электрона из металла 2 будет переходить в состояние с . Энергия этого состояния , поэтому не все электроны, которые могли бы туннелировать при , сумеют преодолеть потенциальный барьер . Следовательно, ток будет пропорционален не , а меньшей величине .

При  гранула может с равной вероятностью находиться в состояниях с  и , обладающих одинаковыми потенциальными энергиями. При туннелировании электронов из металла 2 будут происходить переходы гранулы из состояния с  в состояние с , что требует преодаления потенциального барьера. Но, кроме того, будут происходить переходы из состояния с  в состояние , которые не требуют от электрона преодаления потенциального барьера и, следовательно, совершаются всеми электронами, которые могли бы туннелировать при . В результате вблизи значений напряжения, соответствующих, ток довольно резко возрастает благодаря тому, что открывается второй канал туннелирования, не требующий преодоления электронами потенциального барьера. В результате реализуется вольт-амперная характеристика, представленная на рис. 4.8. ???????????????????

Рис. 4.8. Вольт-амперная характеристика контакта при .

На основе явления кулоновской блокады может быть изготовлен принципиально новый прибор – одноэлектронный транзистор.

**Задачи к гл. 4**

**4.1.** Рассмотреть потенциал , изображенный на рис. 4.1. Предположив, что полная энергия летящей слева направо частицы равна , изобразить качественно (в масштабе рис. 4.1) величину кинетической энергии частицы  в интервале . Считать частицу классической (т.е. воспользоваться классической механикой).

**4.2.** Используя соотношение (4.1), найти выражение для волновой функции  для случая . Используя выражения (4.3) - (4.5), показать, что в случае  отраженный поток равен падающему. Объяснить отличие данного результата от классического.

**4.3.** Определить коэффициент прохождения  треугольного барьера вида:  при ,  при  (рис. 4.9). Рассмотреть случаи , .

*Указаниее*. Воспользоваться формулой (4.7).



**4.4.** Воспользовавшись выражением (4.13) для волновой функции электрона в яме между барьерами и оценкой коэффициентов *А* и *В* для случая , приведенной там же, определить вероятность нахождения электрона в яме.

**4.5.** Рассмотреть структуру, состоящую из трех барьеров с известными амплитудами прохождения  и отражения  (= 1, 2, 3). Расстояние между первым и вторым барьерами считать равным , между вторым и третьим − . Найти амплитуды прохождения и отражения трехбарьерной структуры  и , пренебрегая процессами трехкратного (и более) отражения.

Тема семинара: «Туннельный контакт. Эффект Джозефсона».