ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР ЭКСИТАЛЛОВ

© *Е.Я.Глушко*

Криворожский педагогический институт,
324000 Кривой Рог, Украина
(Поступила в Редакцию 25 августа 1995 г.
В окончательной редакции 6 февраля 1996 г.)

Для гипотетического ограниченного кристалла, описываемого периодической системой потенциальных ям с ширинами, зависящими от энергии возбуждения $a(E)$, — экситалла — получено точное решение обобщенной задачи Кронига–Пенни как для дельтообразных барьеров, так и для барьеров конечной толщины. Предложен метод спектральной диаграммы для описания зонных и локальных состояний кристаллов. Показана возможность обобщения решения на случай зависимости параметров потенциала от собственных значений энергии.

Точно решаемая одномерная неограниченная модель кристаллического потенциала, введенная в 30 годах Кронигом и Пенни [1], является в настоящее время одной из наиболее часто используемых моделей физики периодических квантово-размерных структур, в частности полупроводниковых сверхрешеток [2–4]. Имеется множество работ (см., например, [5–8]), посвященных расчетам электронной структуры зон в периодических размерных структурах в рамках так называемого метода огибающих (envelope function approximation — EFA) [5], когда вместо точной волновой функции (ВФ) используется ВФ, усредненная в атомном масштабе. Объединение EFA с существующими расчетными методами для неограниченных полупроводниковых сред (**kp**-метод, метод ЛКАО и др.) дает для сверхрешеток систему чередующихся мини-зон, обусловленных размерным квантованием. Например, в [5] с использованием модели EFA получена мини-зонная картина для дна зоны проводимости и потолка валентной зоны слоев GaAs/AlGaAs и InAs/GaSb. В [6] в рамках EFA рассчитаны зоны и ВФ кристалла Кронига–Пенни для $GaAs/Al_{0.5}Ga_{0.5}As$. Учет приповерхностного обрыва потенциала в духе Тамма [9] произведен в [7]. Здесь для полуограниченной среды на основе арсенида галлия получены концентрационные зависимости зонной картины с учетом возникающих поверхностных состояний (ПС).

Помимо приближения огибающих в физике твердотельных периодических структур, моделируемых ограниченным потенциалом Кронига–Пенни, используются также трансляционно-инвариантное приближение (ТИП) и приближение эффективной частицы. Последнее приближение связано с некоторой процедурой «стыковки» движения частицы в атомном масштабе и в масштабе сверхструктуры. Расчеты для отдельных слоев с учетом кристаллической симметрии дают эффективные массы и энергетический спектр квазичастицы. В масштабе сверхрешетки частица с рассчитанной эффективной массой теперь движется в макроскопическом потенциале, что приводит к возникновению дополнительной зонной структуры, существенно модифицирующей исходную. Следует иметь ввиду, однако, что потенциал сверхрешетки не может считаться слабым возмущением. Имеющиеся в литературе данные для актуальных сверхструктур с периодами порядка 100 Å дают для величины модификации энергетических параметров (ширины зон и щелей) величины примерно 0.1–1 eV, что по порядку величины совпадает с объемными значениями. Принципиальный ответ на вопрос о границах применимости приближения эффективной частицы в сверхструктурах могла бы дать точно решаемая динамическая модель двух и более контактирующих систем потенциальных ям.

ТИП соответствует тому, что при решении задач на собственные значения точную систему граничных условий (ГУ), разворачивающихся от границы в глубь кристалла, заменяют после введения трансляционного квантового числа уравнениями для некоторой пары ячеек [7,9]. Между тем, как будет показано далее, наличие границы катастрофическим образом сказывается на ВФ состояний системы. В частности, фазы ВФ в различных ямах имеют нелинейную и неспадающую зависимость от номера ямы, отсчитываемого от границы. Попытка анализа эффективного гамильтониана EFA без использования ТИП предложена в [10], где рассмотрен контакт двух систем потенциальных ям.

В настоящей работе предложено точное решение задачи Шредингера для семейства ограниченных потенциалов Кроника-Пенни и их модификации — экситаллов. Разработан $E\Omega$-диаграммный метод, позволяющий наглядно представить полную картину спектра квантово-размерной структуры, включающего зоны, локальные и поверхностные уровни. Анализируются изменения в энергетическом спектре и в условиях существования поверхностных состояний, обусловленные наличием границ. Показано, что экситаллы могут имитировать практически любой одномерный спектр, поставляя при этом в аналитическом виде ВФ всех состояний системы.

1. Ограниченная система потенциальных ям с δ-образными барьерами

Задача Кронига–Пенни допускает расширение области применимости решения. Прежде всего нарушение трансляционной инвариантности, например введение границ, локальных возмущений, в некоторых случаях сохраняет возможность аналитического решения; кроме того, параметры задачи (непроницаемость барьеров и постоянная решетки) могут зависеть от энергии: $\Omega = \Omega(E)$, $a = a(E)$. Рассмотрим вначале ограниченную систему ям, разделенных δ-потенциальными барьерами. Гамильтониан одномерной задачи для N ям имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2 \Delta}{2m^*} + U(x),$$

$$U(x) = \frac{\hbar^2 \Omega(E)}{m^*} \sum_{l=1}^{N-1} \delta\Big(x - la(E)\Big). \tag{1}$$

Энергия E здесь выступает как параметр; собственные значения энергии оговариваются особо (см. пояснения к (13), (15)). Граничные потенциальные стенки, отвечающие левому и правому краям образца, в несимметричной задаче различны $U_0 \not\equiv U_1$. Решение этой задачи, а также рассматриваемого ниже ограниченного потенциала Кронига–Пенни с конечной толщиной барьеров является общим для семейства аналитически решаемых потенциалов, включающего комбинации последних с δ-потенциалами,[1] а также экситаллы. Последние рассматриваются далее (в разделе 3). Стандартные граничные условия без использования ТИП записываются для каждого из межъямных барьеров s

$$\begin{cases} \Psi_s(-) = \Psi_{s+1}(+), \\ \Psi'_s(-) + \Omega(E)\Psi_s(-) = \Psi'_{s+1}(+) - \Omega(E)\Psi_{s+1}(+), \end{cases} \tag{2}$$

где знаки (+) и (−) соответствуют ВФ слева и справа от барьера. Второе из соотношений (2) следует непосредственно из уравнения Шредингера. На границах кристалла в (2) следует полагать $\Omega = 0$. Для плоских потенциалов решение задачи на собственные значения внутри s-й ямы имеет вид

$$\Psi_s(x) = A_s e^{ikx} + B_s e^{-ikx},$$

$$k = \left(\frac{2m^* E}{\hbar^2}\right)^{1/2}. \tag{3}$$

С учетом (3) ГУ (2) приводят к системе $2N+2$ линейных однородных уравнений для весовых коэффициентов A_s, B_s. Структура матрицы этой системы приведена в таблице. После разложения детерминанта Det матрицы граничных условий по первым трем столбцам получим

$$\mathrm{Det} = \hat{S}_0^+ \hat{S}_n, \qquad n = N-1,$$

где

$$\hat{S}_0^+ = (\lambda_0, -\nu_0), \qquad \hat{S}_n^+ = (D_n^1, D_n^2),$$

$$\lambda_i = k(\Omega + k_i)\cos ka + \left(\Omega k_i - k^2\right)\sin ka, \qquad \nu_i = k_i \sin ka + k\cos ka,$$

$$k_i = \left(2m(U_i - E)^{1/2}\right) \Big/ \hbar, \qquad i = 0, 1. \tag{4}$$

«Крест» здесь означает транспонирование и комплексное сопряжение, алгебраические дополнения D_n^1, D_n^2 выражаются через параметры правой границы λ_1, ν_1. Их предельные значения $D_1^1 = \nu_1$, $D_1^2 = -\lambda_1$. Для столбовой матрицы $\hat{S}_n$ справедливо рекуррентное соотношение

$$\hat{S}_m = \hat{\Lambda}\hat{S}_{m-1}, \qquad \hat{\Lambda} = \begin{bmatrix} \mu & \nu \\ \lambda & \mu \end{bmatrix}, \tag{5}$$

[1] В частности, известное ГУ Бастарда [5] для огибающих в полупроводниковых сверхструктурах эквивалентно наличию дополнительных δ-потенциалов на границах слоев с непроницаемостями $\Omega = \Omega(E)(\mu_a - \mu_b)/2\mu_a$, где $\mu_{a,b}$ — эффективные массы в слоях.

Матрица системы граничных условий (2)

$$
\begin{array}{c|cccccccccccccccccc|}
 & 0 & 1 & 1 & 2 & 2 & 3 & 3 & 4 & 4 & \cdot & \cdot & -3 & -3 & -2 & -2 & -1 & -1 & 0 \\
\hline
0 & Z_0 & A & A & & & & & & & \cdot & \cdot & & & & & & & \\
1 & Y_0 & W_0 & W_0^* & & & & & & & \cdot & \cdot & & & & & & & \\
1 & & B & B^* & A & A & & & & & \cdot & \cdot & & & & & & & \\
2 & & C & C^* & D & D^* & & & & & \cdot & \cdot & & & & & & & \\
2 & & & & B & B^* & A & A & & & \cdot & \cdot & & & & & & & \\
3 & & & & C & C^* & D & D^* & & & \cdot & \cdot & & & & & & & \\
3 & & & & & & B & B^* & A & A & \cdot & \cdot & & & & & & & \\
4 & & & & & & C & C^* & D & D^* & \cdot & \cdot & & & & & & & \\
4 & & & & & & & & B & B^* & \cdot & \cdot & & & & & & & \\
\cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & D & D^* & & & & & & & \\
\cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & B & B^* & & & & & & & \\
-3 & & & & & & & & & & & & D & D^* & & & & & \\
-3 & & & & & & & & & & & & B & B^* & A & A & & & \\
-2 & & & & & & & & & & & & C & C^* & D & D^* & & & \\
-2 & & & & & & & & & & & & & & B & B^* & A & A & \\
-1 & & & & & & & & & & & & & & C & C^* & D & D^* & \\
-1 & & & & & & & & & & & & & & & & B & B^* & Z_1 \\
0 & & & & & & & & & & & & & & & & W_1 & W_1^* & Y_1 \\
\hline
\end{array}
$$

П р и м е ч а н и е. $Z_0 = 1$, $A = Z_1 = -1$, $Y_0 = k_0$, $Y_1 = k_1$, $W_0 = -ik$, $B = e^{ika}$, $C = (ik + \Omega)e^{ika}$, $D = -ik + \Omega$. Пунктиром отмечены миноры матрицы: $-\nu_0$ — в левом верхнем углу, μ — следующий минор, $-\lambda_1$ в правом нижнем углу.

где

$$\lambda = \left(\Omega^2 - k^2\right) \sin ka + 2\Omega k \cos ka, \qquad \nu = \sin ka, \qquad \mu = -\Omega \sin ka - k \cos ka.$$

Благодаря равенству диагональных элементов в $\hat{\Lambda}$ матрицы $\hat{\Lambda}^M$ выражаются через четные и нечетные слагаемые биномиальных разложений

$$\hat{\Lambda}^m = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} (\mu+\sqrt{\lambda\nu})^m + (\mu-\sqrt{\lambda\nu})^m, & \xi\sqrt{\frac{\nu}{\lambda}}\left((\mu+\sqrt{\lambda\nu})^m - (\mu-\sqrt{\lambda\nu})^m\right) \\ \left((\mu+\sqrt{\lambda\nu})^m - (\mu-\sqrt{\lambda\nu})^m\right)\bar{\xi}\sqrt{\frac{\lambda}{\nu}}, & (\mu+\sqrt{\lambda\nu})^m + (\mu-\sqrt{\lambda\nu})^m \end{bmatrix},$$

$$\xi = \mathrm{sign}(\nu), \qquad \bar{\xi} = \mathrm{sign}(\lambda), \tag{6}$$

что позволяет записать детерминант в компактном виде. Спектр системы дается нулями Det,

$$\frac{\left(\mu+\sqrt{\lambda\nu}\right)^m}{\left(\mu-\sqrt{\lambda\nu}\right)^m} = \frac{\lambda_1\left(\nu_0+\lambda_0\xi\sqrt{\nu/\lambda}\right)+\nu_1\left(\lambda_0+\nu_0\bar{\xi}\sqrt{\lambda/\nu}\right)}{\lambda_1\left(\lambda_0\xi\sqrt{\nu/\lambda}-\nu_0\right)+\nu_1\left(\nu_0\bar{\xi}\sqrt{\lambda/\nu}-\lambda_0\right)}, \tag{7}$$

где $\lambda, \nu \not\equiv 0$, здесь и далее $m = N-2$. В мезоскопическом случае ($N \simeq 10-30$) вековое уравнение (7) удобнее использовать в виде, исключающем лишние корни λ, $\nu = 0$ и радикалы,

$$\sum_{s=0}^{\tau^*} C_m^{2s}(\lambda\nu)^s\mu^{m-2s}(\nu_0\lambda_1+\lambda_0\nu_1)-\sum_{s=0}^{\tau-1} C_m^{2s-1}(\lambda\nu)^s\mu^{m-2s-1}(\nu\lambda_0\lambda_1+\lambda\nu_0\nu_1)=0. \tag{8}$$

Пределы суммирования выражаются в (8) через целую часть ([*]): $\tau = \left[\frac{m+1}{2}\right]^*$, $\tau^* = \tau - [2\tau/m]^*$. Характер энергетического спектра для $m \gg 1$, как это видно из (7), определяется знаком произведения $\lambda\nu$.

В области $\lambda\nu > 0$ ($\bar{\xi} = \xi$) существуют генерируемые поверхностью или другим возмущением периодичности локальные уровни. Если число потенциальных ям велико ($m \gg 1$), то решение трансцендентного уравнения (7) для $\lambda\nu > 0$ упрощается. В пределе $N \to \infty$ корни совпадают с нулями или полюсами правой части (7) в зависимости от знака μ

$$\sqrt{\frac{\lambda}{\nu}} = \zeta\frac{\lambda_i}{\nu_i}, \qquad i = 0.1, \qquad \zeta = \xi\mathrm{sign}(\mu). \tag{9}$$

Для локальных состояний ($\lambda\nu > 0$)

$$\sqrt{\frac{\lambda}{\nu}} = \zeta\frac{\bar{\Omega}-\Omega}{2}, \tag{10}$$

где $\bar{\Omega}-\Omega$ — локальное возмущение непроницаемости барьера вдали от внешних границ.

В области $\lambda\nu < 0$ радикалы в (7) дают мнимую единицу, и спектр определяется известной формулой Муавра. После преобразований имеем

$$\cos\frac{\pi s+\varphi_{01}}{m} = \cos ka + \frac{\Omega(E)}{k}\sin ka, \tag{11}$$

где

$$\varphi_{01} = (-1)^\beta \arccos\frac{a_{01}}{\sqrt{a_{01}^2+b_{01}^2}},$$

$$a_{01} = \nu_1\lambda_0+\nu_0\lambda_1, \qquad \beta = \mathrm{sign}(b), \qquad b_{01} = \xi\left(\nu_1\nu_0\sqrt{\lambda/\nu}-\lambda_1\lambda_0\sqrt{\nu/\lambda}\right).$$

Индекс s принимает от N до m целых значений для каждой из разрешенных зон при условии, что аргумент косинуса в левой части принадлежит отрезку $[0, \pi]$. Соотношение (11) обобщает результат, полученный Кронигом и Пенни для неограниченного случая. Роль трансляционного волнового числа здесь выполняет $2\pi s/m$. Края зон определяются нулями λ и ν (см. примечание к (7)), центры зон соответствуют точкам $\mu = 0$. Из (11) следует соотношение для плотности зонных состояний ($m \gg 1$)

$$\frac{ds}{dk} = \left[\left(ka + \frac{\Omega}{k}\right)\sin ka - \Omega a \cos ka\right]\frac{m}{\pi\sqrt{-\lambda\nu}}. \tag{12}$$

Максимум электронной плотности приходится на края зон, а минимум — на центры зон, где знаменатель в (12) максимален. Последнее легко показать, если учесть соотношение $\mu^2 = k^2 + \lambda\nu$.

Общий вид фрагмента ВФПС для s-ямы кристалла может быть получен в аналитическом виде методом Крамера [11] (см. таблицу)

$$\Psi_s(x) = \bar{A}\begin{cases} \frac{k^2}{\nu_0}e^{k_0 x}, & s = 0,\ x < 0, \\ b\sin(kx + \alpha_0), & s = 1, \\ \eta e^{\frac{-a(s-2)}{l_0}}\sin(kx_s + \phi), & s \in [2,\, N], \end{cases} \tag{13}$$

где $\alpha_0 = \operatorname{arctg}(k/k_0)$, $b = kg_0/\nu_0$, $\phi = \operatorname{arctg}(k/\zeta_1)$, $\zeta_1 = \Omega(E) + \zeta\sqrt{\lambda\nu}$, $\eta^2 = k^2 + \zeta_1^2$, $s = \left[\frac{x}{a}\right]^* + 1$, $x_s = x - sa + a$, $g_i^2 = 2m^* U_i/\hbar^2$, $\nu_0 = \sin\alpha_0$, $\bar{A}$ — нормировочный коэффициент, $k(E)$ удовлетворяет уравнению (9), скобки $[]^*$ обозначают целую часть. Длина затухания l_0 в (13) определяется выражением

$$l_0 = a\bigg/\left|\ln\frac{k}{|\mu| - \sqrt{\lambda\nu}}\right|. \tag{14}$$

Как это следует из (14), амплитуда ПС совмещает в себе ступенчатую и экспоненциальную зависимости. Вблизи краев зоны $(|\mu| - \sqrt{\lambda\nu}) \to k$, и длина затухания становится порядка размеров кристалла. ВФ локального возмущения $\bar{\Omega} - \Omega$ имеет вид (13), где в показателе экспоненты $s - 2 \to |s - s_1|$, s_1 — номер возмущенного барьера в глубине кристалла, k определяется из (10). Для зонных состояний в третьей строке (13) следует подставлять выражение

$$\eta_0\Big[\sin kx_s\Big((\lambda\nu_0 + \lambda\Omega\nu)\sin(\varphi(s-2)) + \sqrt{-\lambda\nu}(\lambda + \nu_0\Omega)\cos(\varphi(s-2))\Big) +$$
$$+ k\cos kx_s\Big(\lambda_0\nu\sin(\varphi(s-2)) + \nu_0\sqrt{-\lambda\nu}\cos(\varphi(s-2))\Big)\Big],$$
$$\varphi = \arccos(-k/\mu), \qquad s \in [2,\, N]. \tag{15}$$

Теперь k удовлетворяют уравнению (11), зависимость от U_1 содержится в k, $\eta_0 = k\nu_0\sqrt{-\lambda\nu}$. С учетом сделанных добавлений ВФ (13) представляет собой одно из возможных состояний системы.

2. $E\Omega$-диаграмма

Представленная на рис. 1 диаграмма энергии для случая $N \gg 1$, $g_1 = g_0 = 16/a$, включает все решения уравнений (8), (11) для значения Ω, меняющегося от $-30/a(E)$ до $30/a(E)$. Область $\Omega < 0$ соответствует ограниченной периодической системе впадин. Возникновение зон в этой области обусловлено не туннелированием, а надбарьерным отражением. Характер спектра здесь обращенный по сравнению со случаем $\Omega > 0$, максимальное число состояний — в зонах $(N-1)$, а в области $k^2 < 0$ также имеются решения. Ограниченная периодическая система δ-впадин была рассмотрена недавно в [10]; полученные там качественные результаты относительно структуры зон в левой части $E\Omega$-диаграммы согласуются с нашими. Кривая $A \left(y = \left(g_0^2 - \Omega^2 \right)^{1/2} \right)$ разграничивает полуплоскость $\Omega > 0$ по характеру отщепления левого ПС [11]. Спектральная картина системы определяется видом $\Omega(E)$. В простейшем случае $\Omega = \text{const}$ вертикальное сечение диаграммы (линия B) дает чередующиеся разрешенные и запрещенные зоны с локальными уровнями в последних (колонка C). В более сложных случаях спектральная картина задается путем вдоль кривой $k(\Omega)$.

Если N невелико, то вместо (7) и (9) следует использовать (8). Картина спектра для $N = 9$ в случае, когда правый барьер несколько выше левого, приведена на рис. 2. С ростом N заметная трансформация состояний имеет место лишь в области малых Ω. Для $|\Omega| \gg 1$ спектральная картина изменяется слабо.

3. Экситалл

Рассмотренная выше процедура решения остается неизменной и в случае, если параметры решетки кристалла, например a и Ω, зависят от энергии возбуждения. Такую модель можно назвать экситаллом. С ростом энергии частицы в экситалле решеточный потенциал меняет свой вид.

Расчет состояний простейшего ограниченного экситалла — дираковской гребенки — производится при учете только волнового движения. Пространство, отвечающее туннельному движению, не включено в рассмотрение из-за специфического вида взаимодействия. В этом случае $a(E)$ и $\Omega(E)$[2] независимы, и их комбинации могут давать любой тип спектра. Например, множество решений для экситалла, переходящих в пределе изолированных потенциальных ям в спектр одномерного гармонического осциллятора, имеет место в случае

$$a(E) = \pi \left(E - \frac{\hbar\omega}{2} \right) \Big/ \omega\sqrt{2m^* E}, \tag{16}$$

где ω — собственная частота осциллятора. Аналогичный предельный переход для кулоновских потенциальных ям дается 3^d-экситаллом с потенциалом $U(r) = U(x) + U(y) + U(z)$ (см. (1)), где следует учесть энергетическую зависимость постоянных решетки $a_x = a_y = a_z = \pi e^2/E$.

[2] $a(E)$ определяет масштаб осей ka и Ωa на $E\Omega$-диаграмме; выбор конкретного спектра из диаграммы определяется путем вдоль кривой $k = k(\Omega)$.

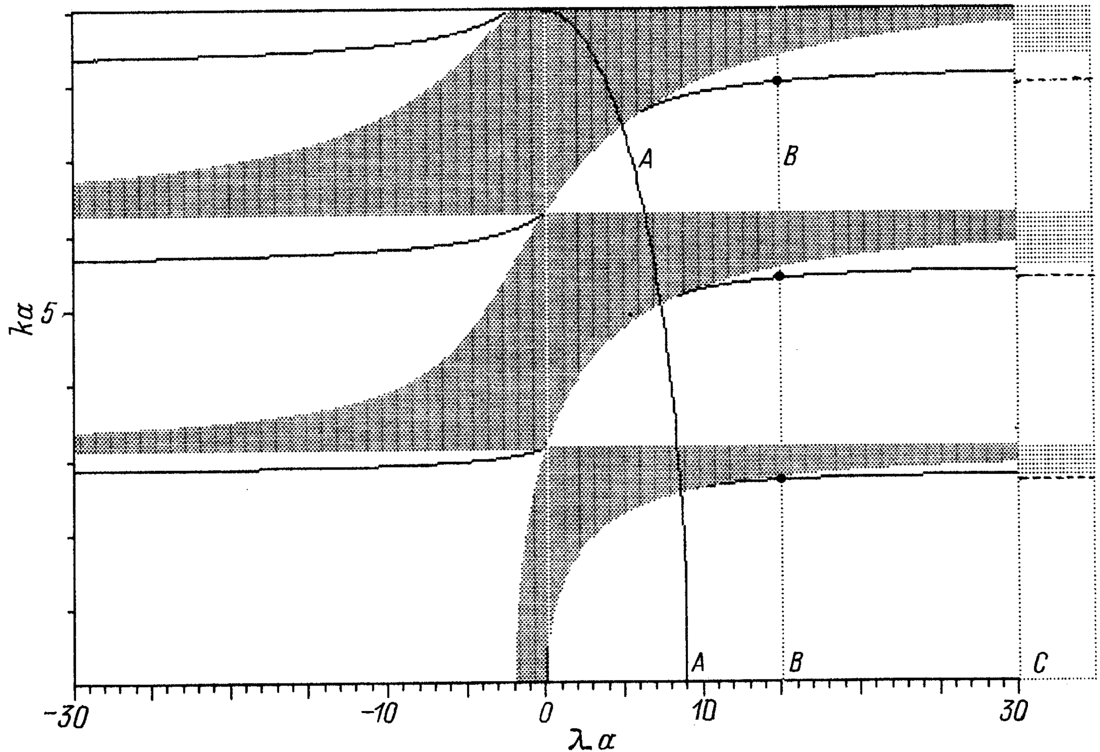

Рис. 1. Диаграмма энергетического спектра симметричной системы плоских потенциальных ям с δ-барьерами.

$ga = g_1 a = 9$. Разрешенные зоны энергий закрашены, сплошные линии относятся к поверхностным состояниям, кривая $A \left(k = \sqrt{g_0^2 - \Omega^2} \right)$ определяет в области $\Omega > 0$ границу отщепления локальных состояний, колонка C — спектр, отвечающий линии B, штриховыми линиями отмечены ПС.

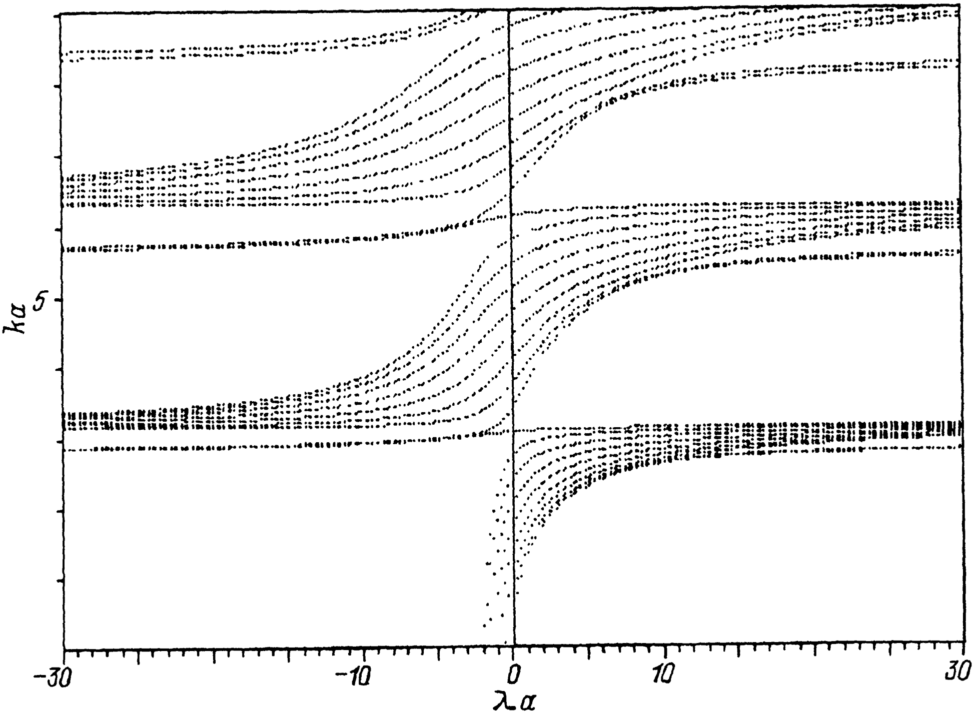

Рис. 2. $E\Omega$-диаграмма для $N = 9$. Асимметричный случай. Точки — решения дисперсионного уравнения (8), $ga = 9$, $g_1 a = 9.5$.

В случае тонких межъямных барьеров в реальном кристалле его спектр близок к спектру экситалла с δ-образными барьерами. Если же изменением ВФ в барьере нельзя пренебречь, то разработанный выше подход должен быть модифицирован.

4. Ограниченный потенциал Кронига–Пенни

В случае ограниченной одномерной решетки Кронига–Пенни с барьерами высотой $\bar{U}$ и шириной b $(a + b = d)$ матрица системы ГУ (см. таблицу) дополняется условиями стыковки волновой и туннельной частей решения

$$\bar{\Psi}_s(x) = \bar{A}_s e^{\bar{k}x} + \bar{B}_s e^{-\bar{k}x},$$

где

$$\bar{k} = \left(2m\left(\bar{U} - E\right)\right)^{1/2} \Big/ \hbar.$$

С помощью рекуррентного соотношения (5) дисперсионное уравнение приводится к виду

$$\left(\tilde{\lambda}_0, \nu_0\right) \hat{\Lambda}_1^n \begin{pmatrix} \nu_1 \\ -\lambda_1 \end{pmatrix} = 0, \qquad n = N - 1, \tag{17}$$

где

$$\tilde{\lambda}_0 = \lambda_0 - \Omega\nu_0, \qquad \tilde{\nu}_1 = k_1\tilde{\nu} - \tilde{\mu}, \qquad \tilde{\lambda}_1 = \lambda - k_1\mu',$$

$$\tilde{\mu} = k^2 \sin ka\, \mathrm{sh}\bar{k}b - \bar{k}k \cos ka\, \mathrm{ch}\bar{k}a,$$

$$\mu' = -\bar{k}^2 \sin ka\, \mathrm{sh}\bar{k}b - \bar{k}k \cos ka\, \mathrm{ch}\bar{k}a, \qquad \hat{\Lambda}_1 = \begin{pmatrix} \tilde{\mu} & \tilde{\nu} \\ \tilde{\lambda} & \mu' \end{pmatrix},$$

$$\tilde{\nu} = \bar{k} \sin ka\, \mathrm{ch}\bar{k}b + k \cos ka\, \mathrm{sh}\bar{k}a,$$

$$\tilde{\lambda} = \bar{k}k \left(\bar{k} \cos ka\, \mathrm{sh}kb - \bar{k}k \sin ka\, \mathrm{ch}\bar{k}a\right). \tag{18}$$

Предельный переход $b \to 0$, $\bar{k}^2 b = 2\Omega$, дает полученное выше решение для δ-образной ограниченной потенциальной гребенки. Диагональные элементы матрицы $\hat{\Lambda}_1$ не равны между собой, поэтому использовать соотношение (5) нельзя. Однако и в этом случае возможность аналитического решения (17) определяется представимостью степени матрицы $\hat{\Lambda}_1$ через некоторую степень матричных элементов. Для достижения цели представим $\hat{\Lambda}_1$ в виде суперпозиции двух матриц $\hat{X}_1$, $\hat{X}_2$, обладающих репродуктивным свойством: $\hat{X}_i^2 = \alpha_i \hat{X}_i$; кроме того, должно выполняться условие ортогональности $\hat{X}_1 \hat{X}_2 = 0$.

$$\begin{pmatrix} \tilde{\mu} & \tilde{\nu} \\ \tilde{\lambda} & \mu' \end{pmatrix} = \frac{\tilde{\mu}}{2} \left[\begin{pmatrix} 1 & t \\ y & ty \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & z \\ -1/t & -z/t \end{pmatrix} \right]. \tag{19}$$

Легко убедиться, что указанные требования удовлетворяются при

$$t = \frac{\mu' - \tilde{\mu}}{2\tilde{\lambda}} + \sqrt{\left(\frac{\tilde{\mu} - \mu'}{2\tilde{\lambda}}\right)^2 + \frac{\tilde{\nu}}{\tilde{\lambda}}},$$

$$y = \frac{\tilde{\mu} - \mu'}{2\tilde{\nu}} + \sqrt{\left(\frac{\tilde{\mu} - \mu'}{2\tilde{\nu}}\right)^2 + \tilde{\lambda}\tilde{\nu}} + \frac{2\tilde{\lambda}}{\tilde{\mu}},$$

$$z = \frac{\tilde{\mu} - \mu'}{2\tilde{\lambda}} - \sqrt{\left(\frac{\tilde{\mu} - \mu'}{2\tilde{\lambda}}\right)^2 + \frac{\tilde{\nu}}{\tilde{\lambda}}} + \frac{2\tilde{\nu}}{\tilde{\mu}}, \tag{20}$$

$$\hat{\lambda}_1^n = \left(\frac{\tilde{\mu}}{2}\right)^n \left(\alpha_1^m \hat{X}_1 + \alpha_2^m \hat{X}_2 + \gamma \hat{G} \frac{\alpha_1^m - \alpha_2^m}{\alpha_1 - \alpha_2}\right), \tag{21}$$

где

$$\gamma \hat{G} = \hat{X}_1 \hat{X}_2, \quad \gamma = 1 + yz, \quad \alpha_1 = 1 + ty, \quad \alpha_2 = 1 - y/z, \quad \tilde{\tilde{\mu}} = (\tilde{\mu} + \mu')/2. \tag{22}$$

С учетом (20)–(22) дисперсионное урвание для ограниченного потенциала Кронига–Пенни принимает вид

$$\left(\tilde{\tilde{\mu}} + \sqrt{\lambda_\nu}\right)^m \left(\tilde{\nu}_1 - \tilde{\lambda}_1 t\right) \left[\tilde{\lambda}_0 \left(1 + \frac{\gamma}{\alpha_1 - \alpha_2}\right) - \frac{\tilde{\nu}_0}{x} \left(ty - \frac{\gamma}{\alpha_1 - \alpha_2}\right)\right] -$$

$$- \left(\tilde{\tilde{\mu}} - \sqrt{\lambda_{nu}}\right)^m \left(\tilde{\nu}_0 + \tilde{\lambda}_0 x\right) \left[\tilde{\lambda}_1 \left(\frac{z}{t} - \frac{\gamma}{\alpha_1 - \alpha_2}\right) + \frac{\tilde{\nu}_1}{t} \left(-1 + \frac{\gamma}{\alpha_1 - \alpha_2}\right)\right] = 0, \tag{23}$$

где $4\lambda_\nu = (\tilde{\mu} - \mu')^2 + 4\lambda\nu$. После преобразования квадратных скобок в (23) имеем

$$\left(\tilde{\tilde{\mu}} + \sqrt{\lambda_{nu}}\right)^m \left(\tilde{\nu}_1 - \tilde{\lambda}_1 t\right)\left(\tilde{\lambda}_0\tilde{\nu} - \tilde{\nu}_0\tilde{\lambda}t\right) +$$
$$+\left(\tilde{\tilde{\mu}} - \sqrt{\lambda_{nu}}\right)^m \left(\tilde{\nu}_0 - \tilde{\lambda}_0 t\right)\left(\tilde{\lambda}_1\tilde{\nu} + \tilde{\nu}_1\tilde{\lambda}t\right) = 0. \tag{24}$$

Характер спектра определяется знаком подкоренного выражения λ_ν. Зонные состояния реализуются в области значений параметров $\lambda_\nu < 0$. Процедура получения уравнения для зонных состояний из (24) рассмотрена выше для случая δ-потенциала. В результате имеем

$$\cos\frac{\pi s + \Phi_x}{m} = \cos ka\,\mathrm{ch}\bar{k}b + \frac{\bar{k}^2 - k^2}{2\bar{k}k}\sin ka\,\mathrm{sh}\bar{k}b, \tag{25}$$

где

$$\Phi_x = \frac{1-\zeta_x}{2}\pi - \mathrm{arctg}\,\frac{\sin\varphi_x\left(\tilde{\nu}_1\tilde{\lambda}_0 + \tilde{\nu}_0\tilde{\lambda}_1\right)}{b_x},$$

$$\zeta_x = \mathrm{sign}(b_x), \qquad b_x = \cos\varphi_x\left(\tilde{\nu}_1\tilde{\lambda}_0 - \tilde{\nu}_0\tilde{\lambda}_1\right) - \left(\tilde{\lambda}_1\tilde{\lambda}_0 + \tilde{\nu}_0\tilde{\nu}_1\lambda\right)\sqrt{-\lambda_\nu}, \tag{26}$$

$$\varphi_x = \frac{\tilde{\mu} - \mu'}{2\sqrt{-\lambda_\nu}}. \tag{27}$$

Влияние границ на энергию и плотность зонных состояний определяется фазой Φ_x, отсутствующей в каноническом дисперсионном уравнении Кронига–Пенни [1,12]. Оценки показывают, что ширины зон устанавливаются уже при $N \approx 15-20$; с дальнейшим ростом N меняется лишь плотность состояний. В широкозонном материале граничная модификация спектра может охватить все актуальные при данной температуре уровни. Если $N \approx 30-100$ и ширина зоны проводимости ≈ 1 eV, то, полагая в (25) $\Phi_x \approx \pi$, $\Delta s \approx 10$, имеем для искаженных областей энергий вблизи дна зоны проводимости и потолка валентной зоны $\Delta\varepsilon \approx 0.1$ eV. Еще в большей степени влияние границ сказывается на ВФ и пространственном распределении электронной плотности в зонных состояниях. Вид ВФ определяется по правилу Крамера прямым расчетом матриц, производных от матрицы системы ГУ. В частном случае δ-барьеров ВФ описана выше формулами (13)–(15).

В области $\lambda_\nu > 0$ существуют локальные и поверхностные состояния. Для случая $m \gg 1$ уравнения для ПС имеют наиболее простой вид

$$\left[\begin{array}{l}\tilde{\nu}_1 = t\tilde{\lambda}_1,\\ \tilde{\nu}_0\tilde{\lambda}t = \tilde{\nu}\tilde{\lambda}_0,\end{array}\right. \qquad \tilde{\tilde{\mu}} > 0, \tag{28}$$

$$\left[\begin{array}{l}\tilde{\nu}_0 = -t\tilde{\lambda}_0,\\ \tilde{\nu}_1\tilde{\lambda}t = -\tilde{\nu}\tilde{\lambda}_1,\end{array}\right. \qquad \tilde{\tilde{\mu}} < 0. \tag{29}$$

Энергетическая диаграмма системы показана для различных толщин барьеров на рис. 3. $E\Omega$-диаграмма для $b = 0.0011a$ (рис. $3, a$) практически совпадает с аналогичной диаграммой для δ-барьеров. При

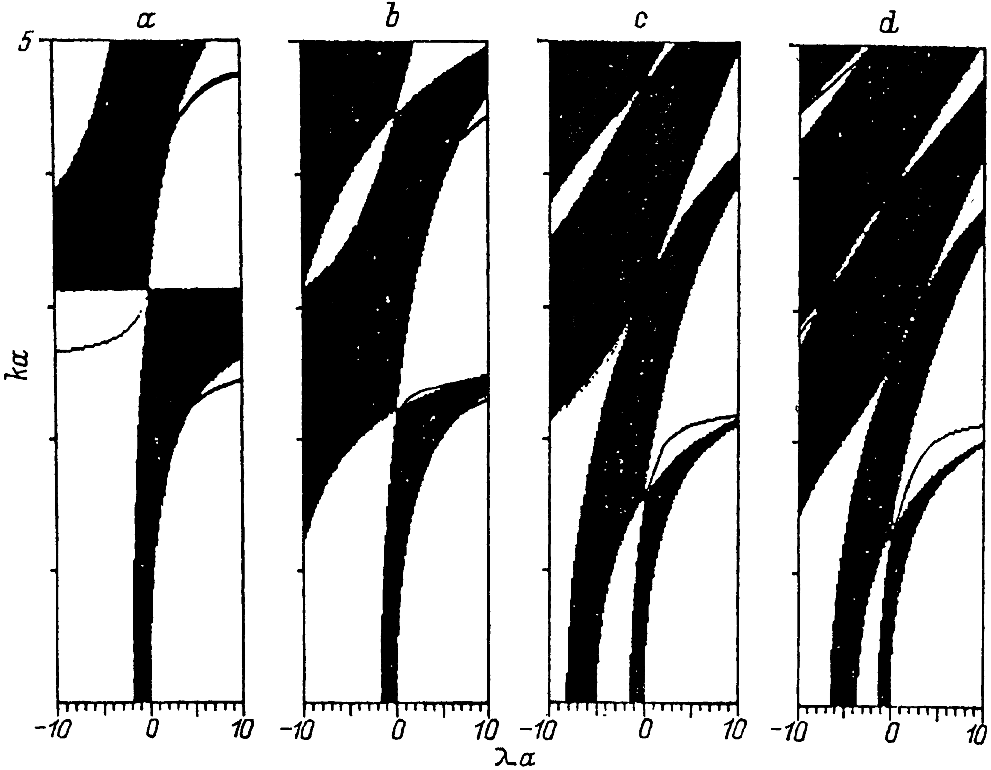

Рис. 3. $E\Omega$-диаграмма для ограниченного потенциала Кронига–Пенни для $b =$ $= 0.0011$ a (a), 0.41 a (b), 1.0 a (c) и 1.41 a (d)

a — диаграмма совпадает с аналогичной для δ-образных барьеров, $\Omega = m^*\bar{U}a/\hbar^2$.

утолщении барьеров из-за эффективного увеличения ширины общей потенциальной ямы число состояний в ней возрастает (рис. 3, b–d), несмотря на уменьшение эффективной глубины. Можно видеть, что с ростом непроницаемости барьеров $\Omega = m^*\bar{U}b/\hbar^2$ в области $\Omega > 0$ зоны сужаются и выталкиваются вверх. Наоборот, при $\Omega < 0$ (барьеры опрокинуты) с ростом $|\Omega|$ зоны опускаются в область $k^2 < 0$. Локальные состояния, обусловленные внешними поверхностями, показаны на рис. 3 сплошными линиями. Спектр сверхструктуры задается соответствующим вертикальным сечением $E\Omega$-диаграммы для данных параметров a, b, $\bar{U}$. Произвольным сечениям отвечают экситаллы. Спектр экситалла, включающий полный набор зонных и локальных состояний в потенциальной яме всего кристалла, их ВФ, дает базис нулевого приближения задачи с произвольным одномерным ограниченным кристаллическим потенциалом. Потенциал $V(x_s)$ в таком подходе определяет в пределах элементарной ячейки зависимость ширины ямы $a(E)$ и барьера $b(E) = d - a(E)$. Кривая $\Omega(E)$ теперь имеет вид

$$\Omega(E) = \frac{m^*\bar{U}(E)b(E)}{\hbar^2}, \tag{30}$$

где $\bar{U}(E)$ задает зависимость высоты внутреннего барьера от энергии.

ВФ в рассматриваемом случае находятся (коэффициенты A_s, B_s) с помощью правила Крамера. Для фрагмента ВФ в s-й элементарной ячейке имеем

$$\Psi_s(x) = \bar{A} \begin{cases} \left(\frac{\mu'\alpha_1'}{2k\bar{k}}\right)^{s-1} (\nu_1' - \lambda_1' t')(\lambda_0'\tilde{\nu} - \nu_0\tilde{\lambda}t') + \left(\frac{\mu'\alpha_2'}{2k\bar{k}}\right)^{s-1} (\nu_1' - \lambda_1' t')(\lambda_0'\tilde{\nu} - \nu_0'\tilde{\lambda}t'); \\ \left(\frac{\tilde{\mu}\alpha_1}{2k\bar{k}}\right)^{s-1} (\nu_1 - \lambda_1 t)(\lambda_0\tilde{\nu} - \nu_0\tilde{\lambda}t) + \left(\frac{\tilde{\mu}\alpha_2}{2k\bar{k}}\right)^{s-1} (\nu_1 - \lambda_1 t)(\lambda_0\tilde{\nu} - \nu_0\tilde{\lambda}t). \end{cases} \tag{31}$$

Здесь $s = \left[\frac{x}{d}\right]^* + 1$, $\nu_1' = -\sin(kx_s)$, $\lambda_1' = -k\cos(kx_s)$, $\nu_0' = 1$, $\lambda_0' = k_0$, $\nu_1 = -\mathrm{sh}\left(\bar{k}\bar{x}_s\right)$, $\lambda_1 = -k\mathrm{ch}\left(\bar{k}\bar{x}_s\right)$, $x_s = x - s_a + a$, $t' = t(\tilde{\mu} \to \mu')$. Верхняя часть (31) описывает вид ВФ внутри ямы, а нижняя — внутри барьера. Соотношение (31) применимо как для локальных, так и для зонных состояний. Однако для зонных состояний можно получить более удобную форму ВФ после раскрытия комплексных выражений в (31) ($\lambda_\nu < 0$), учитывая соотношение для модулей величин

$$|\mu\alpha_1| = |\mu'\alpha_1'| = 2k\bar{k},$$

$$\Psi_s(x) = \bar{A} \begin{cases} \sin\varphi(s-1)\left[\frac{\tilde{\mu}-\mu'}{2}(k\cos kx_s + k_0\sin kx_s) + kk_0\tilde{\nu}\cos kx_s + \right. \\ \qquad \left. + \tilde{\lambda}\cos kx_s\right] - \cos\varphi(l-1)\bar{\xi}\sqrt{\lambda\nu}(k\cos kx_s + k_0\sin kx_s), \\ \sin\varphi(s-1)\left[\frac{\mu'-\tilde{\mu}}{2}\left(\tilde{\lambda}_0\mathrm{sh}\bar{k}\bar{x}_s + \nu_0\bar{k}\mathrm{ch}\bar{k}\bar{x}_s\right) + \tilde{\lambda}\nu_0\mathrm{sh}\bar{k}\bar{x}_s + \right. \\ \qquad \left. + \bar{k}\tilde{\nu}\tilde{\lambda}\mathrm{ch}\bar{k}\bar{x}_s\right] - \cos\varphi(l-1)\bar{\xi}\sqrt{\lambda_\nu}\left(\tilde{\lambda}_0\mathrm{sh}\bar{k}\bar{x}_s + \nu_0\bar{k}\mathrm{ch}\bar{k}\bar{x}_s\right). \end{cases} \tag{32}$$

Другой путь решения задачи с произвольным непрямоугольным ограниченным периодическим потенциалом связан с моделированием потенциала элементарной ячейки ступенчатой зависимостью. Общее дисперсионное уравнение в этом случае имеет вид (17)

$$(-k_0,\, 1)\hat{\Lambda}_0^N \begin{pmatrix} -1 \\ k_1 \end{pmatrix} = 0, \tag{33}$$

где

$$\hat{\Lambda}_0 = \prod_{s=1}^{r} \Lambda_s = \begin{pmatrix} \bar{\mu} & \bar{\nu} \\ \bar{\lambda} & \bar{\mu}' \end{pmatrix}, \qquad \hat{\Lambda}_s = \begin{pmatrix} \mu_s & \nu_s \\ \lambda_s & \mu_s \end{pmatrix}. \tag{34}$$

Здесь s нумерует ступеньки внутри ямы, r — число ступенек, матричные элементы в (34) определяются (5), где следует положить $\Omega = 0$ и $k = k_s$. В таком подходе численные расчеты производятся только при получении матрицы $\hat{\Lambda}_0$, аналитическое решение уравнения (33) получается с использованием предложенной в настоящем разделе процедуры (19)–(22). Результаты (19)–(29) при этом остаются в силе после замены в матричных элементах верхнего индекса тильды на черту.

5. Заключительные замечания

Представленный анализ позволяет сделать общие выводы относительно свойств решений для ограниченных одномерных потенциалов.

Для локализованных состояний отказ от ТИП [1,9] приводит к разному характеру отщепления ПС в различных частях $E\Omega$-диаграммы (рис. 1). Более сложной выглядит зонная картина сверхрешеток. В случае, если внутренние барьеры ниже внешних $\left(\bar{U} < U_0\right)$, вершины $\bar{U}$ оказываются погруженными в одну из зон. Это заключение носит общий характер, поскольку в области энергий вблизи $\bar{U}$ непроницаемость $\Omega(E)$ стремится к нулю.

Неожиданными выглядят заметные отличия точного решения $\Psi(x)$ для зонных состояний (15) и (31), (32) от трансляционно-инвариантных функций Блоха. Амплитуда и фаза ВФ (15), (32) немонотонно и нелинейно зависят от номера ямы s. Как это видно из (15), (32), нелинейной частью фазы пренебрегать нельзя, несмотря на то что для внутренних областей кристалла $kas \gg \varphi$. В целом выход за рамки ТИП слабо модифицирует известную зонную картину (см. (11)) и плотность состояний, однако коренным образом видоизменяет распределение электронной плотности внутри кристалла. Последнее обстоятельство может сильно сказываться на интегральных характеристиках системы, например на диэлектрической проницаемости, подвижности носителей, проводимости и т.п.

Включение в схему сил изображения [13], искажающих приповерхностные потенциальные ямы,

$$\Delta U(x) = \frac{e^2(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)}{\varepsilon_2(\varepsilon_1 + \varepsilon_2)}\,\frac{1}{2x}$$

(где ε_1, ε_2 — диэлектрические проницаемости внешней среды и кристалла соответственно, e — заряд частицы) приводит в симметричном случае к обобщенному дисперсионному уравнению

$$(-k_0,\, 1)\prod_{s=1}^{r}\hat{\Lambda}_s\hat{\Lambda}^{m-2r}\prod_{s=r}^{1}\hat{\Lambda}_s\begin{pmatrix}-1\\ \bar{k}_1\end{pmatrix} = 0, \tag{35}$$

где r — число ячеек у левой (правой) границы кристалла с существенным приповерхностным сдвигом потенциала. Для простоты барьеры, разделяющие ячейки, считаются здесь δ-образными. В случае $N \gg 2r$ зонная картина (рис. 1,3) практически не подвержена действию сил изображения, однако локальные состояния заметно изменяются

$$\left(\bar{\lambda} - k_0\bar{\mu}\right)\sqrt{|\nu|} - \zeta\left(k_0\bar{\nu} - \bar{\mu}'\right)\sqrt{|\lambda|} = 0. \tag{36}$$

Здесь матричные элементы определяются согласно (32), k_0 в соответствии с (4) учитывает сдвиг дна граничных потенциальных ям.

В семейство точно решаемых потенциалов входит также трехмерный потенциал сферической сверхрешетки, представляющей собой чередующиеся шаровые слои двух материалов. Подобные сверхструктуры теоретически изучены слабо. Рассмотренная выше процедура в полной мере применима к центрально-симметричным состояниям в такой системе — сферическим волнам. В частности, в случае δ-функциональных барьеров в сферической сверхрешетке задача на собственные значения сводится к дисперсионному уравнению вида (33), где вместо элементов левой матрицы-строки ν_0, λ_0 (см. (4)) следует подставлять

$$\nu_0 = -\sin k_0 r_0, \qquad \lambda_0 = -k_0 \cos k_0 r_0 - \left(\Omega - \frac{1}{r_0}\right) \sin k_0 r_0,$$

r_0 — радиус внутренней сферы, элементы матрицы $\hat{\Lambda}_s$ имеют вид

$$\nu_s = \sin ka, \qquad \mu_s = k \cos ka + \left(\Omega - \frac{1}{r_0 + as}\right) \sin ka,$$

$$\mu'_s = k \cos ka + \left(\Omega + \frac{1}{r_0 + a(s-1)}\right) \sin ka,$$

$$\lambda_s = -k\left(2\Omega - \frac{1}{r_0 + as} + \frac{1}{r_0 + a(s-1)}\right) \cos ka +$$

$$+ \left(k^2 - \left(\Omega - \frac{1}{r_0 + as}\right)\left(\Omega + \frac{1}{r_0 + a(s-1)}\right)\right) \sin ka,$$

$$k_1 = k + \frac{1}{r_0 + Na}. \tag{37}$$

Предел $r_0 \to \infty$ дает полученный в разделе 1 результат для ограниченной плоской системы потенциальных ям с δ-функциональными барьерами как для локальных, так и для зонных состояний.

Автор признателен Э.А.Пашицкому, В.И.Сугакову и П.Н.Томчуку за полезное обсуждение работы.

В заключение автор выражает благодарность Международному фонду Дж.Сороса за частичную поддержку этой работы.

Список литературы

[1] Kronig R.L., Penney W. Proc. Roy. Soc. **130**, 499 (1931).
[2] Esaki L. IEEE J. Quant. Electron. **QE-22**, 1611 (1986).
[3] Bastard G. Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures. Les Edition de Physique. Les Ulmes Cedex France (1988).
[4] Силин А.П. УФН **147**, 485 (1985).
[5] Bastard G. Phys. Rev. **B24**, 5693 (1981).
[6] Hung-Sik Cho, Prucnal P.L. Phys. Rev. **B36**, 3237 (1987).
[7] Steslichka M., Kucharchuk R., Glasser M.L. Phys. Rev. **B42**, 1458 (1990).
[8] Sasaki A. Phys. Rev. **B30**, 7016 (1984).
[9] Тамм И.Е. ЖЭТФ **3**, 34 (1933); Лифшиц И.М., Пекар С.И. УФН **56**, *4*, 531 (1955).
[10] Brezini A., Zekri M. Solid State Commun. **86**, 613 (1993).
[11] Глушко Е.Я. ФТТ **36**, 2417 (1994); ФТТ **38**, 223 (1996).
[12] Лившиц Е.М., Питаевский Ф.П. Статистическая физика. М. (1978). Т. 9. Ч. 2.
[13] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Электродинамика сплошных сред. М. (1978). Т. 8.