

УДК 621.315.592

© 1992

ОБ ИЗЛУЧЕНИИ КОРОТКОВОЛНОВЫХ ФОНОНОВ ПРИ ТУННЕЛИРОВАНИИ. II

Э. М. Баскин, Л. С. Брагинский

Показано, что благодаря закону сохранения импульса вероятность неупругих процессов с испусканием коротковолнового фонона при туннелировании через гладкий барьер относительно мала и введение примесей позволяет увеличить соответствующие вероятности.

В этой части работы мы рассмотрим влияние формы потенциального барьера на вероятность излучения коротковолновых фононов при туннелировании. В п. 1 мы покажем, что вероятность излучения таких фононов при туннелировании через гладкий потенциальный барьер экспоненциально мала. Поэтому для исследования фононного спектра методом неупругой туннельной спектроскопии необходимо делать барьер резким либо вводить в него примеси.

В п. 2 получено выражение для туннельного матричного элемента $T_{p_1 p_2}$ для прямоугольного потенциального барьера. В п. 3 исследовано влияние упругорассеивающих примесей на $T_{p_1 p_2}$, вычисленный в п. 2. Показано, что такие примеси могут существенно увеличить $T_{p_1 p_2}$, а следовательно, и неупругую составляющую туннельного тока.

1. Об излучении коротковолновых фононов при туннелировании через гладкий потенциальный барьер

Рассмотрим модельную (для простоты одномерную) задачу о возбуждении фононов при туннелировании через потенциальный барьер, предполагая, что гладкость барьера допускает применимость квазиклассического приближения. Туннельный матричный элемент $T_{p_1 p_2}$ определяется как

$$T_{p_1 p_2} = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_r^* H_{\text{int}} \psi_l dz, \quad (1)$$

где $H_{\text{int}} = g e^{i q z}$; $g(\omega, q)$ — матричный элемент электрон-фононного взаимодействия, зависящий от механизмов взаимодействия; q — волновой вектор фонона; ψ_r и ψ_l — волновые функции, определенные, как это принято в приближении туннельного гамильтониана, затухающими в соответствующих областях вне барьера. В приближении ВКБ запишем

$$\psi_r = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{\pi p_2}} \exp \left[- \int_a^z |p_2| dz - i \left(\int_a^z p_2 dz - \frac{\pi}{4} \right) \right], & z < a, \\ \sqrt{\frac{2}{\pi |p_2|}} \exp \left[- \int_z^b |p_2| dz \right], & a \leq z \leq b, \\ 2 \sqrt{\frac{2}{\pi p_2}} \cos \left(\int_b^z p_2 dz - \frac{\pi}{4} \right), & z > b, \end{cases}$$

$$\psi_l = \begin{cases} 2 \sqrt{\frac{2}{\pi p_1}} \cos \left(\int_z^a p_1 dz - \frac{\pi}{4} \right), & z < a, \\ \sqrt{\frac{2}{\pi |p_1|}} \exp \left[- \int_a^z |p_1| dz \right], & a \leq z \leq b, \\ \sqrt{\frac{2}{\pi p_1}} \exp \left[- \int_a^b |p_1| dz + i \left(\int_a^z p_1 dz + \frac{\pi}{4} \right) \right], & z \geq b. \end{cases} \quad (2)$$

Здесь a и b — точки поворота (рис. 1), $p_{1,2} = \sqrt{2m [E_{1,2} - U(z)]}$ — подбарьерный импульс, $E_{1,2}$ — энергия электрона с той или иной стороны барьера, $E_1 - E_2 = \hbar\omega_q$ — энергии фонона.

Интеграл (1) удобно вычислять, считая переменную z комплексной. Путь интегрирования при этом можно сдвинуть в верхнюю полуплоскость (рис. 2). Тогда присутствие быстроосциллирующей экспоненты e^{iqz} в подынтегральном выражении (1) приведет к экспоненциальному затуханию последнего. Вклад в интеграл (1) будут вносить главным образом окрестности точек z_n , в которых потенциал $U(z)$, а следовательно, и волновые функции ψ_r, ψ_l имеют особенность [1].

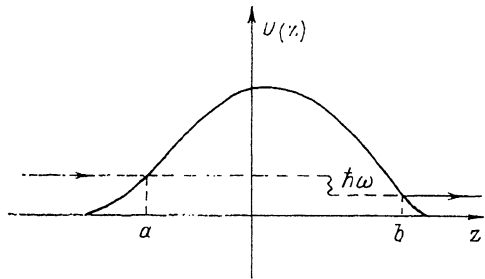


Рис. 1. Туннелирование через гладкий потенциальный барьер.

Пусть d — характерный размер потенциала $U(z)$, не имеющего особенностей на действительной оси, тогда $\text{Im} z_n \sim d$. И в случае коротковолновых фононов $q \sim \pi/a_0$ туннельный матричный элемент будет экспоненциально мал $T_{p_1, p_2} \propto \exp(-qd) \sim \exp(-\pi d/a_0)$. Так, например, для потенциала $U(z) = U_0/\text{ch}^2(z/d)$, $z_n = id(\pi/2 + \pi n)$ и $T_{p_1, p_2} \propto \exp(-\pi^2 d/2a_0)$.

Приведенный выше простой анализ имеет место, если подынтегральное выражение в (1) таково, что допускает смещение пути интегрирования в верхнюю полуплоскость достаточно далеко, где $\text{Im} z \geq z_0$ (z_0 — ближайшая к действительной оси особенность потенциала $U(z)$), и вклад в (1) от областей интегрирования вдали от особенностей экспоненциально мал. Это действительно имеет место для гладких потенциальных барьеров, когда применимо приближение ВКБ и волновые функции можно записать в виде (2). В противном случае смещение пути интегрирования в верхнюю полуплоскость, как правило, приводит к экспоненциальному росту подынтегрального выражения уже при $\text{Im} z < z_0$.

Это означает, что для увеличения неупругой компоненты туннельного тока необходимо использовать барьеры с резким краем, где нарушается квазиклассичность. Этого можно также достичь введением в барьер короткодействующих примесей.

2. Туннельный матричный элемент для прямоугольного потенциального барьера

Пусть эффективная масса электрона слева и справа от барьера (области 1 и 2) равна соответственно m_1 и m_2 . Прямоугольный потенциальный барьер, высота которого U_0 , расположен в области $0 \leq z \leq d$. Эффективная масса

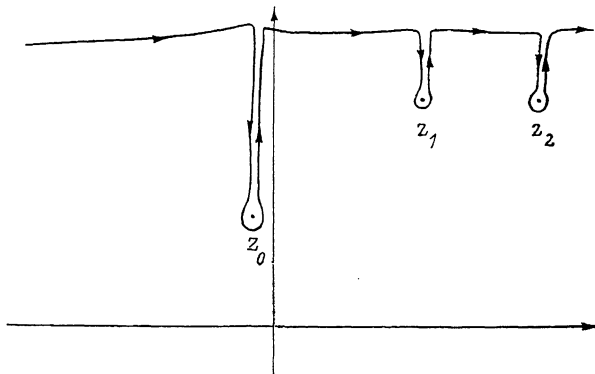


Рис. 2. Путь интегрирования при вычислении (1).

электрона в барьере M . Тогда в приближении туннельного гамильтониана волновые функции ψ_l и ψ_r имеют вид

$$\psi_l = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin(p_{1\perp} z + \delta_1) \exp(ip_{1\parallel} r), & z < 0, \\ \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{p_{1\perp} M}{\sqrt{M^2 p_{1\perp}^2 + m_1^2 \kappa_1^2}} \exp(-\kappa_1 z + ip_{1\parallel} r), & z > 0, \end{cases}$$

$$\psi_r = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin[p_{2\perp}(z-d) + \delta_2] \exp(ip_{2\parallel} r), & z < d, \\ \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{p_{2\perp} M}{\sqrt{M^2 p_{2\perp}^2 + m_2^2 \kappa_2^2}} \exp[\kappa_2(z-d) + ip_{2\parallel} r], & z > d, \end{cases} \quad (3)$$

$$\operatorname{tg} \delta_1 = -\frac{p_{1\perp} M}{\kappa_1 m_1}, \quad \operatorname{tg} \delta_2 = \frac{p_{2\perp} M}{\kappa_2 m_2}.$$

Здесь $p_{1,2\parallel}$ и $p_{1,2\perp}$ — составляющие квазиимпульса электрона: параллельная плоскости барьера ($z=0$) и перпендикулярная ей. Индексы 1 и 2 относятся к соответствующим областям вне барьера, $E_{1,2} = (p_{1,2\parallel}^2 + p_{1,2\perp}^2)/2m_{1,2}$ — энергия электрона, $\kappa_{1,2} = \sqrt{2M(U_0 - E_{1,2}) + p_{1,2\perp}^2}$, r — радиус-вектор в плоскости барьера $r = \{x, y\}$. Определенный по формуле (1) T_{p_1, p_2} имеет вид

$$T_{p_1, p_2}^0 = \frac{8\pi M p_{1\perp} g \delta (p_{1\parallel} - p_{2\parallel} + q_{\parallel})}{\sqrt{M^2 p_{1\perp}^2 + m_1^2 \kappa_1^2}} \left\{ \frac{M p_{2\perp}}{\sqrt{M^2 p_{2\perp}^2 + m_2^2 \kappa_2^2}} \frac{1}{\kappa_2 - \kappa_1 + iq_{\perp}} + \right.$$

$$\left. + \frac{i}{2} \left[\frac{e^{i\delta_2}}{i(q_{\perp} + p_{2\perp}) - \kappa_1} - \frac{e^{-i\delta_2}}{i(q_{\perp} - p_{2\perp}) - \kappa_1} \right] \right\} \exp [(-\kappa_1 + iq_{\perp})d] -$$

$$\frac{8\pi M P_{1\parallel} P_{2\perp} g^0 (P_{1\parallel} - P_{2\parallel} + q_{\parallel})}{\sqrt{M^2 P_{1\perp}^2 + m_1^2 \kappa_1^2} \sqrt{M^2 P_{2\perp}^2 + m_2^2 \kappa_2^2}} \frac{1}{\kappa_2 - \kappa_1 + iq_{\perp}} \exp(-\kappa_2 d). \quad (4)$$

Происхождение двух слагаемых в (4) связано с испусканием фононов вблизи границ барьера, где потенциал изменяется скачкообразно. Первое слагаемое (пропорциональное $\exp(-\kappa_1 d)$) соответствует испусканию фононов вблизи границы $z=d$, второе — вблизи границы $z=0$.

Отметим, что в (4) формально не учтены специфически поверхностные эффекты электрон-фононного взаимодействия [2], связанные со скачкообразным изменением потенциала на границе. Из-за «рифления» поверхности, вызванного тепловыми колебаниями решетки, на границе возникает взаимодействие электронов с поперечными фононами. Кроме того, добавляется взаимодействие с поверхностными фононами. Оба этих эффекта приводят только к увеличению $g(\omega, q)$ и в дальнейшем не учитываются. Считаются одинаковыми упругие константы слева и справа от барьера и в самом барьере. В противном случае возникают отраженная и прошедшая фононные моды, что необходимо учитывать в H_{int} .

Будем далее считать, что область 2 занимает полупроводник с низким уровнем легирования, так что $|\mathbf{p}_2| \rightarrow 0$. Тогда

$$\kappa_1 \simeq \sqrt{2M(U_0 - E_1) + q_{\parallel}^2}, \quad \kappa_2 \simeq \sqrt{2M(U_0 - E_2)} = \sqrt{2M(U_0 - E_1) + 2M\omega(q)},$$

$\hbar\omega(q)$ — энергия фонона. В рассматриваемом случае барьеров малой прозрачности величина T определяется главным образом величиной туннельной экспоненты $\exp(-\kappa_{1,2}d) \ll 1$. В отсутствие неупругости $T = T^e \propto \exp(-d\sqrt{2M(U_0 - E_1)})$. При этом $T^e \sim 10^{-3} \div 10^{-5}$, так что даже относительно малое уменьшение подбарьерной длины волны κ^{-1} приводит к существенному уменьшению T . По сравнению с T^e обе экспоненты суммы (4) малы. Слагаемое, пропорциональное $\exp(-\kappa_2 d)$, уменьшается из-за наличия $2M\omega(q)$ в выражении для κ_2 — излучение фонона вблизи границы $z=0$ приводит к «эффективному повышению барьера» для туннелирующего электрона. Слагаемое, пропорциональное $\exp(-\kappa_1 d)$, мало, если $q_{\parallel} \sim \pi/a_0$. Появление q_{\parallel} в выражении для κ_1 связано с законом сохранения составляющей квазиимпульса электрона, параллельной плоскости барьера. Как мы увидим далее, наличие примесей в барьере приводит к существенному увеличению туннельной экспоненты, так как появляется возможность излучения фонона вблизи границы $z=d$, а избыточный квазиимпульс $\hbar q_{\parallel}$ «берет на себя» примесь.

3. Влияние упругорассеивающих примесей на неупругую компоненту туннельного тока

Туннельный матричный элемент в этом случае будем считать по формуле (1), подставив в нее ψ_l и ψ_r , определенные из решения уравнения Шредингера для барьера с примесями. Если потенциал примесей мал, то последнее можно решать по теории возмущений. Пусть $\psi = \psi_0 + \psi_1$, где ψ_0 — решение (2) невозмущенного уравнения Шредингера; ψ_1 — поправка, связанная с примесью. Тогда

$$\psi_1(\mathbf{r}) = -\frac{M}{2\pi} \int \psi_0(\mathbf{r}') V(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_0) \frac{\exp[-R\sqrt{2M(U-E)}]}{R} d^3r',$$

\mathbf{r}_0 — положение примеси, $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$. Если радиус действия примеси мал, то

$$\psi_1(\mathbf{r}) = f\psi_0(\mathbf{r}_0) \frac{\exp[-R\sqrt{2M(U-E)}]}{R},$$

f — амплитуда рассеяния. В этом приближении, используя в качестве ϕ_0 (3), для поправок к ψ_l и ψ_r найдем

$$\begin{aligned} \psi_l^1 &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{fp_{1\perp}M}{\sqrt{M^2 p_{1\perp}^2 + m_1^2 x_1^2}} \sum_i \exp(-x_1 z_i + ip_{1\parallel} r_i) \times \\ &\times \int \frac{1}{\sqrt{2M(U_0 - E_1) + k^2}} \exp[ik(r - r_i) - |z - z_i| \sqrt{2M(U_0 - E_1) + k^2}] d^2 k, \\ \psi_r^1 &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{fp_{2\perp}M}{\sqrt{M^2 p_{2\perp}^2 + m_2^2 x_2^2}} \sum_i \exp(-x_2 z_i + ip_{2\parallel} r_i) \times \\ &\times \int \frac{1}{\sqrt{2M(U_0 - E_2) + k^2}} \exp[ik(r - r_i) - |z - z_i| \sqrt{2M(U_0 - E_2) + k^2}] d^2 k. \quad (5) \end{aligned}$$

Здесь $\{r_i, z_i\}$ — координаты i -й примеси в плоскости барьера и перпендикулярная ей координата. Подставляя (3) и (5) в (1), найдем поправки к туннельному матричному элементу, связанные с рассеянием на примесях

$$\begin{aligned} T^1 &= \sum_i \exp[i(p_{1\parallel} - p_{2\parallel} + q_{\parallel})r_i] \{A \exp[(iq_{\perp} - x_1 + x_2)z_i - x_2 d] + B \exp[(x_2 - \gamma_1)z_i - \\ &- x_2 d] + C \exp[-(x_1 + \gamma_2)z_i - x_2 d] + D \exp[-(x_1 - \gamma_2)z_i + (iq_{\perp} - \gamma_2)d]\}. \quad (6) \end{aligned}$$

Здесь

$$\gamma_1 = \sqrt{2M(U_0 - E_1) + (p_{1\parallel} + q_{\parallel})^2}, \quad \gamma_2 = \sqrt{2M(U_0 - E_2) + (p_{2\parallel} - q_{\parallel})^2}.$$

Выражения для коэффициентов A, B, C, D мы приводить не будем из-за их громоздкости. Важно, что они не зависят от координат примесей r_i, z_i . Подставляя $T = T^0 + T^1$ в формулу (4) первой части статьи, можно получить выражение для туннельного тока, в котором необходимо произвести усреднение по положениям примесей. Из этой же формулы (4) видно, что требуется усреднить $|T|^2$. Будем далее опускать члены, содержащие экспоненты, малые по сравнению с $T^{el} \propto \exp(-d\sqrt{2M(U_0 - E_1)})$, тогда $|T|^2 \simeq |T^1|^2$. Запишем для краткости (6) в виде

$$T^1 = \sum_i \exp[i(p_{1\parallel} - p_{2\parallel} + q_{\parallel})r_i] \Phi(z_i).$$

Тогда

$$|T^1|^2 = \sum_{i,j} \exp[i(p_{1\parallel} - p_{2\parallel} + q_{\parallel})(r_i - r_j)] \Phi(z_i) \Phi^*(z_j).$$

Усреднение по координатам примесей в плоскости барьера r в осциллирующей функции приводит к появлению суммы членов — зеркального, в котором $p_{1\parallel} - p_{2\parallel} + q_{\parallel} = 0$, и диффузного в случае $i_j = j_j$.

$$\begin{aligned} |T|^2 &= |T_r|^2 + |T_d|^2, \\ |T_r|^2 &= \sum_{i,j} \Phi(z_i) \Phi^*(z_j) \delta_{p_{1\parallel} - p_{2\parallel} + q_{\parallel}}, \\ |T_d|^2 &= \sum_i \Phi(z_i) \Phi^*(z_i). \quad (7) \end{aligned}$$

Здесь $\delta_{p_{1\parallel} - p_{2\parallel} + q_{\parallel}}$ — дельта Кронеккера. При усреднении по z_i будем предполагать, что примеси разбросаны равномерно в области барьера $0 < z < d$. Подставляя усредненные значения $|T_r|^2$ и $|T_d|^2$ в формулу (4) предыдущей статьи, получим выражения для второй производной туннельного тока

$$\frac{\partial^2 I_r}{\partial (eV)^2} = \frac{4}{3\pi^2 \hbar^5} \frac{em_1 N p_{1\perp} p_0^3 M^4 |g|^2 S N_i^2 f^2}{m_2 x_2^2 (M^2 p_{1\perp}^2 + m_1^2 x_1^2)} \frac{G(eV) \exp(-2\gamma_1 d)}{\gamma_1^2 (x_2 - \gamma_1)^2 [(x_1 - \gamma_1)^2 + q_{\perp}^2]},$$

$$\frac{\partial^2 I_d}{\partial (eV)^2} = \frac{1}{6\pi^4 \hbar^5} \frac{em_1 N p_0^3 M^4 |g|^2 SN_{if}^2}{m_2 x_2^2} G(eV) \int \frac{p_{1\perp}}{M^2 p_{1\perp}^2 + m_1^2 x_1^2} [C_1 \exp(-2x_1 d) + C_2 \exp(-2\gamma_1 d)] d^2 p_{1\perp}. \quad (8)$$

Здесь

$$C_1 = \frac{4}{x_2 - x_1} \left| \frac{1}{(iq_{\perp} - x_1)^2 - \gamma_1^2} + \frac{1}{(iq_{\perp} + x_2)^2 - \gamma_2^2} \right|^2 + \frac{1}{(\gamma_2 - x_1) \gamma_2^2},$$

$$\left| \frac{1}{iq_{\perp} + x_2 - \gamma_2} - \frac{1}{iq_{\perp} - \gamma_2} \right|^2,$$

$$C_2 = \frac{1}{\gamma_1^2 (x_2 - \gamma_1) [(x_1 - \gamma_1)^2 + q_{\perp}^2]}.$$

В (8) предполагается, что $M^2 p_0^2 \ll m_2^2 x_2^2$. Приведем также выражение для второй производной туннельного тока для прямоугольного барьера, не содержащего примесей

$$\frac{\partial^2 I}{\partial (eV)^2} = \frac{4}{3\pi^2 \hbar^5} \frac{em_1 N p_{1\perp} p_0^3 M^4 |g|^2 S}{m_2 x_2^2 (M^2 p_{1\perp}^2 + m_1^2 x_1^2)} G(eV) |C_3 \exp[(iq_{\perp} - x_1) d] - C_4 \exp(-x_2 d)|^2 \times$$

$$\times (M^2 p_0^2 \ll m_2^2 x_2^2),$$

$$C_3 = \frac{1}{iq_{\perp} + x_2 - x_1} \frac{1}{iq_{\perp} - x_1},$$

$$C_4 = \frac{1}{iq_{\perp} + x_2 - x_1}.$$

Обратим внимание на туннельные экспоненты в формулах (8). Если уровень легирования полупроводника мал, то в выражении для I_r''

$$p_{2\parallel} \rightarrow 0, \quad \gamma_1 = \sqrt{2M(U_0 - E_1) + (p_{1\parallel} + q_1)^2} \simeq \sqrt{2M(U_0 - E_1)}.$$

Другими словами, туннельная экспонента в выражении для I_r такая же, как и для туннельного тока в отсутствие неупругих процессов.

При интегрировании по $p_{1\parallel}$ в выражении для I_d существенной является область интегрирования $\delta p_{1\parallel} \sim \sqrt{2M(U_0 - E_1)}/d$, в которой туннельная экспонента имеет порядок $\exp[\sqrt{2M(U_0 - E_1)} d]$. Тогда $I_d/I_r \sim \hbar M \omega_0 / N_d$.

4. Обсуждение результатов

Мы показали, что вероятность излучения коротковолнового фонана при туннелировании через гладкий потенциальный барьер экспоненциально мала. Это можно понять из следующих качественных соображений.

Классическая сила F , действующая на туннелирующий электрон, равна $F = -\Delta U$. Такая же сила действует со стороны электрона на кристаллическую решетку, что может привести к возбуждению фонана с квазиимпульсом, не превышающим $\hbar q = F \Delta t$. Если оценивать время туннелирования как $\Delta t \sim \hbar / U_0$, то $q \sim |\nabla U| / U_0$. Для гладких барьеров $|\nabla U| \sim U_0 / d$ ($d \gg a_0$ — ширина барьера), т. е. фононы с $\lambda \ll d$ возбуждаться не могут.

Для их возбуждения необходимо создать неоднородность поля в барьере на длинах порядка a_0 . Этим, вероятно, можно объяснить наблюдаемое в работе [3] значительное (в 50 раз) увеличение пика второй производной тока, связанного с излучением коротковолновых фононов в экспериментах на туннельном микроскопе. Неоднородность поля вблизи иглы туннельного микроскопа приводит к излучению фононов с длиной волны порядка $2\pi/a_0$.

Роль коротковолновых примесей, помещенных в барьер, двойка.

Во-первых, такие примеси создают искажения потенциала барьера на расстояниях порядка радиуса действия примеси, что ведет к появлению дополнительного канала возбуждения фононов. Если полагать, что фонон рождается в области пространства размером порядка его длины волны, то можно говорить о коротковолновых фононах, излучаемых в месте нахождения примеси. В случае гладкого потенциального барьера такой механизм является единственным. Если же имеют место разрывы потенциала (например, на границах раздела металл—окисел, окисел—полупроводник), то фононы рождаются как на границах раздела, так и на примесях. Если концентрация примесей достаточно велика ($N_i \sigma d \gg 1$, σ — сечение рассеяния на примеси), то примесный механизм преобладает.

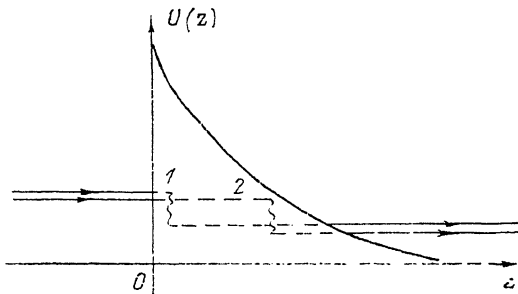


Рис. 3. Туннелирование через барьер Шоттки.

Во-вторых, рассеяние на примесях приводит к существенному увеличению туннельной экспоненты, что подробно рассмотрено в п. 3. Это важно при туннелировании через барьер Шоттки в полупроводник n -типа (рис. 3). Если электрон излучает фонон вблизи границы $z=0$, то большую часть пути он туннелирует с меньшей энергией, т. е. барьер для него выше, чем для упруготуннелирующего электрона. При наличии примесей у электрона появляется возможность излучить фонон в точке 2 внутри барьера. Этот электрон большую часть пути туннелирует с большей энергией, и туннельная экспонента для него почти такая же, как для упруготуннелирующего электрона.

Авторы благодарны А. П. Ковчавцеву, К. О. Постникову, И. М. Субботину, обратившим наше внимание на явления неупругого туннелирования в прямозонных полупроводниках и стимулировавшим проведение соответствующих расчетов.

С п и с о к л и т е р а т у р ы

- [1] Ландау Л. Д., Лифшиц И. М. Квантовая механика. М.: Наука, 1974. С. 221.
- [2] Баскин Э. М., Энтин М. В. // ФТТ. 1971. Т. 13. № 3. С. 903—904.
- [3] Smith D., Binnig G., Quate C. // Appl. Phys. Lett. 1986. Т. 49. (24). P. 1641—1643.

Институт физики полупроводников
СО РАН
Новосибирск

Поступило в Редакцию
17 июня 1991 г.