Письма в ЖТФ, том 18, вып. 16 26 августа 1992 г.

01; 11

ВЛИЯНИЕ ЭЛЕКТРИЧЕСКОГО ПОЛЯ НА ПОВЕРХНОСТНЫЕ (ТАММОВСКИЕ) СОСТОЯНИЯ

М.М. Врубель

В настоящей работе предлагаются результаты, предсказывающие характер влияния электрического поля на поверхностные состояния, возникающие вследствии различия блоховских функций контактирующих веществ или сверхрешеток. Путем прямого решения уравнения Шредингера в электрическом поле с комплексными значениями энергий получены зависимости резонансного значения энергии (E_0) и ширины энергетического уровня (Γ) от напряженности электрического поля для поверхностных состояний различной глубины залегания (E_S), расположенных в зоне запрещенных энергий, а также для различных значений разрывов дна зон контактирующих веществ (V) в одномерной модели в приближении эффективной массы.

Будем применять метод огибающих в следующей модификации. Волновая функция в приближении огибающих записывается в виде произведения быстро меняющихся блоховских функций края зоны $\delta_A(z)$, $\delta_B(z)$ (соответственно в слое A и слое B) на медленно меняющуюся огибающую функции $F(z)$ (рассматриваем однозонное приближение):

$$\psi(z)=\begin{cases} F(z)\delta_A(z) & z<0 \\ F(z)\delta_B(z) & z>0. \end{cases} \qquad (1)$$

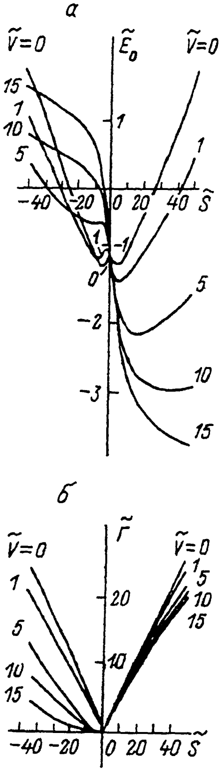
Для того чтобы получить граничные условия для огибающих естественно использовать условие непрерывности на границе двух слоев самой волновой функции (1) и ее производной (считаем, что $m_A=m_B=m^*$):

$$\begin{aligned} &F_A(z)\delta_A(z)=F_B(z)\delta_B(z)\big|_{z=0}, \\ &F_A'(z)\delta_A(z)+F_A(z)\delta_A'(z)=F_B'(z)\delta_B(z)+F_B(z)\delta'(z)\big|_{z=0}. \end{aligned} \qquad (2)$$

Отсюда

$$\frac{F_A'(z)}{F_A(z)}-\frac{F_B'(z)}{F_B(z)}=\frac{\delta_B'(z)}{\delta_B(z)}-\frac{\delta_A'(z)}{\delta_A(z)}\bigg|_{z=0}. \qquad (3)$$

Будем задавать в качестве исходной характеристики E_S - абсолютное значение глубины залегания поверхностного состояния относительно более глубокого дна зоны проводимости двух рассматриваемых слоев (для определенности, относительно дна слоя A ($z<0$))



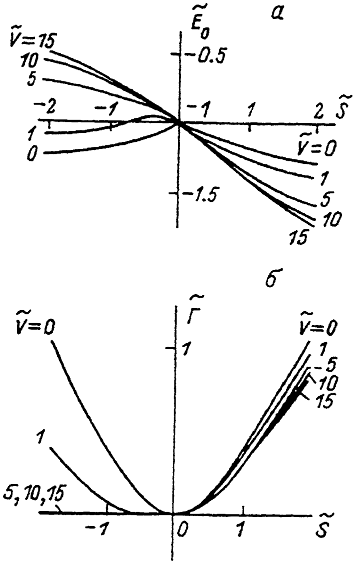


Рис. 1,2. а) Действительно часть нормализованной энергии E_0 для различных значений $\tilde V$ как функция нормализованной напряженности электрического поля $\tilde S$. б) нормализованная резонансная ширина $\tilde\Gamma$ для различных значений $\tilde V$ как функция нормализованной напряженности электрического поля $\tilde S$.

В нулевом электрическом поле уравнение (3) сводится к виду:

$$k_A+k_B=\frac{\delta_B'(z)}{\delta_B(z)}-\frac{\delta_A'(z)}{\delta_A(z)}\Bigg|_{z=0}, \qquad (4)$$

где

$$k_A=(2m^*E_S/\hbar^2)^{1/2}, \quad k_B=(2m^*(E_S+V)/\hbar^2)^{1/2}. \qquad (5)$$

Подобные условия сшивки, учитывающие различие блоховских функций, были выведены в работе [1] с помощью несколько другого подхода, а также обсуждались, например, в [2].

Уравнение Шредингера для электронов в электрическом поле в приближении эффективной массы с учетом различия блоховских функций граничащих слое имеет вид:

$$-\frac{\hbar^2 d^2F(z)}{2m^* dz^2}-(E-|e|Sz-V^*+G\delta(z))F(z)=0, \qquad (6)$$

где m^* – эффективная масса, e – заряд электрона, S – напряженность электрического поля, в нашем случае $V^*=0$ в слое A($z<0$) и $V^*=V$ в слое B ($z>0$), $\delta(z)$ – δ – функция Дирака, $G=(2m^* E_S/\hbar^2)^{1/2}\ (1+(1+V/E_S)^{1/2}$.

Поскольку потенциальная энергия стремится к $-\infty$, когда z стремится к $-\infty$, в системе не существует действительно связанного состояния, и взамен решения уравнения Шредингера конечного при z, стремящемся к $-\infty$, будем рассматривать уходящую волну [3, 4], что соответствует частице в конце концов покидающей поверхностное состояние путем туннелирования. В результате решения уравнения Шредингера мы получим набор комплексных величин, которые могут быть записаны в виде:

$$E=E_0-i\Gamma/2, \qquad (7)$$

где Γ всегда положительно.

E_0 представляет собой энергию квазистационарного уровня, Γ – резонансную ширину этого уровня. Время жизни в квазистационарном состоянии определяется как

$$\tau=\hbar/\Gamma. \qquad (8)$$

Рассмотрим случай $S>0$. Решение уравнения (6) с уходящей волной является линейной комбинацией двух независимых функций Эйри [4, 5]:

$$F(z)=\begin{cases} a_1(Bi_A(Z)+iAi_A(Z) & z<0 \\ a_2 Ai_B(Z) & z>0, \end{cases} \qquad (9)$$

где

$$Z=-\left[\frac{2m^*}{(e\hbar S)^2}\right]^{1/3}\ (E-V^*-|e|Sz). \qquad (10)$$

Используя условие сшивки (3) для огибающих (9) получаем уравнение:

$$\frac{Bi_A'(Z)+iAi_A'(Z)}{Bi_A(Z)+iAi_A(Z)}-\frac{Ai_B'(Z)}{Ai_B(Z)}=\left.\frac{(2m^*E_S/\hbar^2)^{1/2}(1+(1+V/E_S)^{1/2})}{(2m^*|e|S/\hbar^2)^{1/3}}\right|_{z=0}, \qquad (11)$$

решение которого дает искомые значения E (штриховкой в последнем уравнении обозначено дифференцирование по Z). Аналогично получаем уравнение для $S<0$:

$$\frac{Bi_B'(Z)+iAi_B'(Z)}{Bi_B(Z)+iAi_B(Z)}-\frac{Ai_A'(Z)}{Ai_A(Z)}=\frac{(2m^*E_S/\hbar^2)^{1/2}(1+(1+V/E_S)^{1/2})}{-(2m^*|e|S/\hbar^2)^{1/3}}\Bigg|_{z=0}. \quad (12)$$

Введем следующие нормализованные величины:

$$\tilde{E}=E/E_S,\quad \tilde{V}^*=V^*/E_S,\quad \tilde{S}=|e|S\hbar/(2m^*E_S^3)^{1/2}. \quad (13)$$

Тогда

$$Z|_{z=0}=-(1/\tilde{S}^2)^{1/3}(\tilde{E}-\tilde{V}^*). \quad (14)$$

Для отыскания значений E уравнения (11), (12) были решены численно с достаточно высокой степенью точности с использованием рядов и ассимптотических приближений функции Эйри с комплексным аргументом [5]. Результаты решения представлены на рис. 1, 2.

Как видно на рис. 1, 2(а), в зависимости от глубины поверхностного состояния (E_S) для одних и тех же значений электрического поля энергия поверхностного состояния может и возрастать и убывать с полем. Для пояснения ситуации приведем два примера. Пусть $m^*=0.45\ m_0$, где m_0 – масса свободного электрона; $E_{S1}=0.001$ эВ, $E_{S2}=0.1$ эВ, тогда $\tilde{S}=1$ будут соответствовать $S_1\approx 1.1$ кэВ/см и $S_2\approx 1100$ В/см. Ясно, что для достатоно глубоких поверхностных состояний область возрастания E_0 с ростом S для $S>0$ относится к фантастически большим полям.

Влияние V, как видно на рис. 1, 2. вносит ассиметрию в зависимость $E(S)$, тем большую, чем больше V. Для больших $\tilde{V}$ в зависимости $E_0(\tilde{S})$ для малых $\tilde{S}$ присутствует участок почти линейной зависимости.

Представленные результаты позволяют составить представление (по крайней мере качественное) о характере влияния электрического поля на поверхностное состояние, возникающее вследствие различия блоховских функций контактирующих слоев. Это может оказаться полезным и, например, в связи с тем, что, что существующие подходы к экспериментальному обнаружению поверхностных состояний связаны с помещением исследуемых структур в электрическое поле [6, 7].

Список литературы

[1] Zhu Qi-Gao, Kroemer H. // Phys. Rev. 1983. V. 27. N 6. P. 3519-3527.

[2] Тиходеев С.Г. // ЖЭТФ. 1991. Т. 99. В. 6. С. 1871-1880.

[3] Ландау Д.Л., Лифшиц Е.М. Квантовая механика (нерелятивистская теория). М.: Наука, 1989. 768 с.

[4] A h n D., C h u a n g S.L. // Phys. Rev. 1986. V. B34. N 12. P. 9034-9037.
[5] Справочник по специальным функциям / Под редакцией М. Абрамовица и И.А. Стигуна. М.: Наука, 1979. 832 с.
[6] A g u l l o-R u e d a F., M e n d e z E.E. O h n o H., H o n g J.M. // Phys. Rev. 1990. V.B 42. N 2. P. 1470-1473.
[7] O h n o H., M e n d e z E.E., B r u m J.A., H o n g J.M., A g u l l o-R u e d a F., C h a n g L.L., E s a k i L. // Phys. Rev. Lett. 1990. V. 64. N 21. P. 2555-2558.

Белорусский
государственный
университет

Поступило в Редакцию
6 июля 1992 г .