

Диэлектрическая проницаемость квазидвумерных полупроводниковых наноструктур

© Н.Л. Баженов[†], К.Д. Мынбаев, Г.Г. Зегря

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Получена 19 июня 2006 г. Принята к печати 26 июня 2006 г.)

Исследуется пространственная и временная дисперсия диэлектрической проницаемости электронного газа в квазидвумерных квантовых наноструктурах. Впервые получены аналитические выражения для диэлектрической проницаемости в случае квантовой ямы в виде δ -функции и прямоугольной ямы конечной глубины. Получен критерий перехода к строго двумерному и строго трехмерному случаям.

PACS: 71.15.Mb, 71.45.Gm, 73.21.Fg

1. Введение

В настоящее время большое внимание уделяется созданию и исследованию полупроводниковых наноструктур, в частности структур в виде квантовых ям, квантовых нитей и квантовых точек. При теоретической оценке параметров таких структур одноэлектронная модель не всегда применима. При учете взаимодействия между частицами необходимо корректно учитывать в таких структурах эффект экранирования электрического поля зарядов [1–5]. Известно, что экранирование потенциала зарядов в двумерном случае приводит к существенно другой пространственной зависимости диэлектрической проницаемости по сравнению с трехмерным случаем. Так, в трехмерном случае зависимость фурье-компоненты диэлектрической проницаемости от волнового вектора q имеет вид [6]: $\epsilon(q) \propto \text{const}/q^2$, что приводит к следующей пространственной зависимости потенциала пробного заряда от расстояния r :

$$\varphi(r) = \frac{e \exp(-r/r_D)}{r}, \quad (1)$$

т. е. потенциал экспоненциально убывает с расстоянием (r_D — радиус экранирования). Для невырожденного газа носителей заряда величина r_D совпадает с радиусом экранирования Дебая.

С другой стороны, в двумерном случае аналогичная зависимость диэлектрической проницаемости имеет вид $\epsilon(q) \propto \text{const}/q$, и для потенциала внутри пленки толщиной a было получено [7]

$$\varphi(r) = e \left\{ \frac{1}{r} - \frac{\pi}{a} \left[H_0 \left(\frac{2r}{a} \right) - N_0 \left(\frac{2r}{a} \right) \right] \right\}, \quad (2)$$

где $H_0(x)$ и $N_0(x)$ — функции Струве и Неймана соответственно. Для очень больших расстояний ($r \gg a/2$) потенциал принимает вид

$$\varphi(r) = \frac{ea^2}{4r^3}. \quad (3)$$

Видно, что в этом случае нет радиуса экранирования, а потенциал убывает как куб расстояния. Таким образом, при исследовании электронных эффектов в квантовых структурах важно корректно учитывать эффект экранирования. В частности, известно [8–10], что коэффициент усиления полупроводниковых лазерных структур на квантовых ямах непосредственно выражается через диэлектрическую проницаемость, и поэтому знание закона ее пространственной дисперсии важно для корректного расчета параметров таких структур.

Сложность заключается в том, что реальная полупроводниковая квантовая яма не является строго двумерной структурой, поскольку не только обладает отличной от нуля шириной, но и ввиду конечности высоты потенциального барьера описывается волновыми функциями, которые, хотя и экспоненциально затухают, но все же отличны от нуля и вне квантовой ямы.

Цель работы состоит в следующем. Отталкиваясь от двух предельных случаев для трехмерного и двумерного электронного газа, мы рассмотрим квантовые ямы в виде δ -функции и прямоугольной ямы с бесконечно высокими стенками, ограничиваясь случаем одного уровня размерного квантования. Сопоставление этих моделей интересно тем, что если в первой из них волновые функции отличны от нуля только вне ямы, то во второй — только внутри ямы. И наконец, мы получим выражение для диэлектрической проницаемости в случае прямоугольной потенциальной ямы конечной глубины (также ограничиваясь только одним уровнем) и покажем, при каких параметрах ямы эта модель сводится к рассмотренным ранее.

2. Основные соотношения

Для нахождения диэлектрической проницаемости мы воспользуемся методом самосогласованного поля, который, как известно [11], при вычислении диэлектрической проницаемости приводит к результатам, аналогичным получаемым в приближении хаотических фаз.

Если ввести одночастичную матрицу плотности ρ , то ее изменение во времени подчиняется уравнению

[†] E-mail: bazhnil.ivom@mail.ioffe.ru

Лиувилля:

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [\hat{H}, \rho], \quad (4)$$

где одночастичный гамильтониан \hat{H} содержит зависящее от координат и времени малое возмущение $V(\mathbf{r}, t)$:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V(\mathbf{r}, t). \quad (5)$$

Здесь невозмущенный одночастичный гамильтониан равен

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U_0(\mathbf{r}), \quad (6)$$

где \hat{p} — оператор импульса, m — масса электрона, U_0 — периодический потенциал в отсутствие возмущения, а волновые функции зависят от волнового вектора \mathbf{k} и квантового числа l и удовлетворяют уравнению Шредингера

$$\hat{H}_0|\mathbf{k}, l\rangle = E_{\mathbf{k}, l}|\mathbf{k}, l\rangle, \quad (7)$$

причем

$$|\mathbf{k}, l\rangle = \frac{1}{\Omega^{1/2}} u_{\mathbf{k}, l}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \quad (8)$$

где Ω — объем, а $u_{\mathbf{k}, l}(\mathbf{r})$ — периодическая часть блоховской функции.

Энергия $E_{\mathbf{k}, l}$ электрона в зоне l выражается через волновой вектор \mathbf{k} и массу электрона m_l как $E_{\mathbf{k}, l} = \hbar^2 k^2 / 2m_l$. Невозмущенная матрица плотности $\rho_0(k)$ подчиняется следующему уравнению:

$$\rho^{(0)}|\mathbf{k}, l\rangle = f_0(E_{\mathbf{k}, l})|\mathbf{k}, l\rangle, \quad (9)$$

где

$$f_0(E_{\mathbf{k}, l}) = \left[\exp\left(\frac{E_{\mathbf{k}, l} - \mu}{T}\right) + 1 \right]^{-1} \quad (10)$$

— распределение Ферми–Дирака, μ — уровень химического потенциала.

Предположим, что возмущение $V(t)$, которое для рассматриваемого подхода самосогласованного поля представляет собой полный потенциал, имеет следующую временную зависимость:

$$V_0(t) = V_0(0) e^{i\omega t + \alpha t}, \quad (11)$$

где α мало. После линеаризации уравнения (4) можно получить выражение для матричного элемента матрицы плотности:

$$\begin{aligned} & \langle \mathbf{k}, l | \delta \rho(0) | \mathbf{k} + \mathbf{q}, l' \rangle \\ &= \frac{V_q(0) [f_0(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, l'}) - f_0(E_{\mathbf{k}, l})]}{E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, l'} - E_{\mathbf{k}, l} - \hbar\omega + i\hbar\alpha} (\mathbf{k}, l | \mathbf{k} + \mathbf{q}, l'), \end{aligned} \quad (12)$$

где

$$(\mathbf{k}, l | \mathbf{k} + \mathbf{q}, l') = \frac{1}{\Xi} \int d\xi u_{\mathbf{k}, l}^*(\xi) u_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, l'}(\xi), \quad (13)$$

Ξ — объем элементарной ячейки.

Изменение локальной концентрации имеет вид

$$\begin{aligned} \delta n &= \text{Sp}(\hat{n} \delta \rho) \\ &= \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}, l, \mathbf{q}, l'} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} (\mathbf{k} + \mathbf{q}, l' | \mathbf{k}, l) \langle \mathbf{k}, l | \delta \rho | \mathbf{k} + \mathbf{q}, l' \rangle. \end{aligned} \quad (14)$$

Тогда из уравнения Пуассона для фурье-компоненты наведенного потенциала получаем

$$\begin{aligned} V_q^s(0) &= \frac{4\pi e^2}{q^2 \Omega} \\ &\times \sum_{\mathbf{k}, l, l'} \frac{V_q(0) |(\mathbf{k}, l | \mathbf{k} + \mathbf{q}, l')|^2 [f_0(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, l'}) - f_0(E_{\mathbf{k}, l})]}{E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, l'} - E_{\mathbf{k}, l} - \hbar\omega + i\hbar\alpha}, \end{aligned} \quad (15)$$

а диэлектрическая проницаемость равна

$$\begin{aligned} \varepsilon(\omega, q) &= 1 - \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{4\pi e^2}{q^2 \Omega} \\ &\times \sum_{\mathbf{k}, l, l'} \frac{|(\mathbf{k}, l | \mathbf{k} + \mathbf{q}, l')|^2 [f_0(E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, l'}) - f_0(E_{\mathbf{k}, l})]}{E_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, l'} - E_{\mathbf{k}, l} - \hbar\omega + i\hbar\alpha}. \end{aligned} \quad (16)$$

Выражение (16) получено в работе [11] с использованием вышеприведенных рассуждений.

Строго двумерный случай может быть проанализирован аналогично, однако имеются некоторые особенности. Теперь волновые функции имеют другой вид: по двум координатам x и y , которые мы обозначим общим символом \mathbf{r} (а не общепринятым ρ , чтобы не путать с матрицей плотности), они описываются блоховскими функциями. По координате z в строго двумерном случае вероятность обнаружения заряженной частицы строго равна нулю. При решении уравнения Пуассона фурье-компоненты получаются только для направлений, параллельных плоскости ямы, а по координате z уравнение приходится решать непосредственно. В результате для диэлектрической проницаемости имеем

$$\varepsilon(\omega, q) = 1 - \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{2\pi e^2}{Sq} \Upsilon, \quad (17)$$

$$\Upsilon = \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}, l, l'} \frac{|(\mathbf{k}_{\parallel}, l | \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}, l')|^2 [f_0(E_{\mathbf{k}_{\parallel}+\mathbf{q}, l'}) - f_0(E_{\mathbf{k}_{\parallel}, l})]}{E_{\mathbf{k}_{\parallel}+\mathbf{q}, l'} - E_{\mathbf{k}_{\parallel}, l} - \hbar\omega + i\hbar\alpha}, \quad (18)$$

где S — площадь „нормировочного ящика“, а \mathbf{k}_{\parallel} — волновой вектор в плоскости, в которой движутся носители заряда. Мы видим, что главное отличие по сравнению с трехмерным случаем состоит в том, что в знаменателе второго члена стоит q , а не q^2 . Как отмечалось во Введении, это приводит к существенно разным выражениям для экранирования в двумерном и трехмерном случаях [7, 12].

Физическая ситуация появления „двумерной“ зависимости заключается в том, что характерный размер $(1/q)$ пространственной протяженности фурье-компоненты потенциала в направлении z превышает характерный размер волновой функции в этом направлении. Последний в данном случае просто равен нулю. Интересно проследить, как эта ситуация проявляется в следующих модельных структурах: потенциальной яме в виде δ -функции, прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками и прямоугольной потенциальной яме конечной глубины. Дело в том, что в первой из них волновая функция отлична от нуля только вне ямы, во второй — только внутри ямы, а в третьей — как внутри, так и вне ямы. Кроме того, последний случай является наиболее интересным с практической точки зрения.

3. Потенциальная яма в виде δ -функции

В данном случае волновые функции носителей заряда по двум координатам x и y (т.е. \mathbf{r}) описываются блоховскими функциями, а по координате z они соответствуют решению уравнения Шредингера для потенциальной ямы в виде δ -функции $U = -\beta\delta(z)$, см. [13, задача 2.7]:

$$\Phi(z) = k_{\perp}^{1/2} e^{-k_{\perp}|z|} = \sqrt{\frac{m\beta}{\hbar^2}} \exp\left(-\frac{m\beta}{\hbar^2}|z|\right), \quad (19)$$

где

$$k_{\perp} = \frac{m\beta}{\hbar^2}. \quad (20)$$

В такой яме имеется только один уровень.

Рассуждая аналогично тому, как в предыдущих разделах, мы получим для матричного элемента матрицы плотности:

$$\begin{aligned} & \langle \mathbf{k}_{\parallel}, l | \delta\rho(0) | \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}, l' \rangle \\ &= \frac{V_{q,k_{\perp}} [f_0(E_{\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}, l'}) - f_0(E_{\mathbf{k}_{\parallel}, l})] \langle \mathbf{k}_{\parallel}, l | \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}, l' \rangle}{E_{\mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}, l'} - E_{\mathbf{k}_{\parallel}, l} - \hbar\omega + i\hbar\alpha}. \end{aligned} \quad (21)$$

Однако в данном случае, как и в строго двумерном случае, разложение потенциала в ряд Фурье производится только в плоскости ямы. Поэтому

$$V(\mathbf{r}, z) = \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}}(z) e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}}, \quad (22)$$

$$V_{q,k_{\perp}} = k_{\perp} \int dz e^{-2k_{\perp}|z|} V_{\mathbf{q}}(z). \quad (23)$$

Для концентрации электронов получаем

$$\begin{aligned} \delta n &= \frac{k_{\perp}}{S} \exp(-2k_{\perp}|z|) \\ &\times \sum_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{q}\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}, l, l'} \langle \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}, l' | \mathbf{k}_{\parallel}, l \rangle \langle \mathbf{k}_{\parallel}, l | \delta\rho | \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}, l' \rangle. \end{aligned} \quad (24)$$

Уравнение Пуассона для наведенной потенциальной энергии имеет вид

$$\begin{aligned} -q^2 V_{\mathbf{q}}^s(z) + \nabla_z^2 V_{\mathbf{q}}^s(z) &= -\frac{4\pi e^2 k_{\perp}}{S} \exp(-2k_{\perp}|z|) \\ &\times \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}, l, l'} \langle \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}, l' | \mathbf{k}_{\parallel}, l \rangle \langle \mathbf{k}_{\parallel}, l | \delta\rho | \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}, l' \rangle. \end{aligned} \quad (25)$$

Вновь видим, что по сравнению с трехмерным случаем зависимость от z осталась в явном виде. Для ее нахождения необходимо решить уравнение (25).

В принципе необходимо по отдельности рассмотреть решение в случае $q \neq 2k_{\perp}$ и $q = k_{\perp}$. При $q \neq 2k_{\perp}$ для диэлектрической проницаемости получаем

$$\varepsilon(\omega, q) = 1 - \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{4\pi e^2 k_{\perp}}{S(q^2 - 4k_{\perp}^2)} \left[\frac{1}{2} - \frac{4k_{\perp}^2}{q(2k_{\perp} + q)} \right] \Upsilon, \quad (26)$$

где Υ дается выражением (18).

В литературе принято представлять результат для квазидвумерного случая, выделяя в явном виде множитель $2\pi e^2/q$, соответствующий чисто двумерному случаю, и вводя формфактор $F(q)$, который явно учитывает отклонение от чисто двумерного случая. В рассматриваемом случае выражение (26) запишется следующим образом:

$$\varepsilon(\omega, q) = 1 - \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{2\pi e^2}{Sq} F(q) \Upsilon, \quad (27)$$

причем формфактор имеет вид

$$F(q) = \frac{k_{\perp}}{2k_{\perp} + q} \left[1 + \frac{2k_{\perp}}{2k_{\perp} + q} \right]. \quad (28)$$

Прежде всего отметим, что если последовательно рассмотреть решение уравнения (25) для случая $q = 2k_{\perp}$, то получим значение $F(q = 2k_{\perp}) = 3/8$, которое получается и из выражения (28) при соответствующей подстановке.

Рассмотрим (28) в двух интересных предельных случаях: $q \gg k_{\perp}$ и $q \ll k_{\perp}$.

1. $q \ll k_{\perp}$.

В этом случае характерный размер волновой функции в направлении z , т.е. $1/k_{\perp}$, меньше характерного размера для изменения потенциальной энергии $1/q$. Видно, что при $q \rightarrow 0$

$$F(q \rightarrow 0) = 1, \quad (29)$$

и мы приходим к строго двумерному случаю.

2. $q \gg k_{\perp}$.

В этом случае характерный размер волновой функции в направлении z , т.е. $1/k_{\perp}$, превышает характерный размер для изменения потенциальной энергии $1/q$. Тогда

$$F(q \rightarrow \infty) \approx \frac{k_{\perp}}{q}, \quad (30)$$

а диэлектрическая проницаемость равна

$$\varepsilon(\omega, q \rightarrow \infty) = 1 - \lim_{\alpha \rightarrow 0} \frac{2\pi e^2 k_{\perp}}{S q^2} \Upsilon. \quad (31)$$

Таким образом, с точностью до численного множителя полученное выражение соответствует объемному случаю.

Как видим, условие перехода к „двумерной“ зависимости диэлектрической проницаемости от волнового вектора заключается в том, что характерный размер фурье-компоненты потенциала в направлении z ($1/q$) превышает размер волновой функции k_{\perp}^{-1} .

4. Прямоугольная потенциальная яма конечной глубины

Рассмотрим в рамках общего подхода более реалистичный случай прямоугольной ямы конечной глубины U_0 . Ограничимся первым уровнем размерного квантования с энергией электронов $E < U_0$. Волновые функции в направлении z соответствуют решению для прямоугольной потенциальной ямы шириной a [14]. Тогда

$$\Phi_{k_{\perp}}(z) = \begin{cases} C \sqrt{\frac{E}{U_0}} e^{\kappa x}, & x \leq 0, \\ C \sin(k_{\perp} x + \delta), & 0 < x < a, \\ C e^{\kappa a} \sqrt{\frac{E}{U_0}} e^{-\kappa x}, & x \geq a, \end{cases} \quad (32)$$

$$C = \frac{\kappa^{1/2}}{\left[1 + \frac{1}{2} \kappa a\right]^{1/2}}. \quad \sin \delta = \sqrt{\frac{E}{E_0}}. \quad (33)$$

Здесь

$$\kappa = \frac{1}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}, \quad (34)$$

$$k_{\perp} = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}. \quad (35)$$

Выражение для волновых функций имеют вид

$$|\mathbf{k}, l\rangle = \frac{1}{\sqrt{S}} u_{\mathbf{k}_{\parallel}, l}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \mathbf{r}} \Phi_{k_{\perp}}(z). \quad (36)$$

Уравнение Пуассона для наведенной потенциальной энергии имеет вид

$$\begin{aligned} & -q^2 V_q^s(z, t) + \nabla_z^2 V_q^s(z, t) \\ & = \begin{cases} -Q C^2 \frac{k_{\perp}^2}{\kappa^2 + k_{\perp}^2} e^{2\kappa z}, & \text{если } z \leq 0, \\ -Q C^2 \sin^2(k_{\perp} z + \delta), & \text{если } 0 < z < a, \\ -Q C^2 \frac{k_{\perp}^2}{\kappa^2 + k_{\perp}^2} e^{2\kappa(a-z)}, & \text{если } z \geq a, \end{cases} \end{aligned} \quad (37)$$

$$Q = \frac{4\pi e^2}{S} \sum_{\mathbf{k}_{\parallel}, l, l'} (\mathbf{k}_{\parallel}, +\mathbf{q}, l' | \mathbf{k}_{\parallel}, l) \langle \mathbf{k}_{\parallel}, l | \delta \rho | \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{q}, l' \rangle. \quad (38)$$

Вновь зависимость от z осталась в явном виде. Для ее нахождения необходимо решить уравнение (37).

Для диэлектрической проницаемости вновь имеем выражение (27), а формфактор равен

$$\begin{aligned} F(q) &= \frac{2\kappa^2}{\left[1 + \frac{1}{2} \kappa a\right]^2} \left\{ (1 + e^{-qa}) \xi^2 + D \xi - \frac{4k_{\perp}^4 (1 - e^{-qa})}{q^2 (4k_{\perp}^2 + q^2)^2} \right. \\ &\times \left[1 + \frac{q^2}{2(\kappa^2 + k_{\perp}^2)} \right]^2 + \frac{3q\kappa}{4(4k_{\perp}^2 + q^2)(\kappa^2 + k_{\perp}^2)} \\ &\left. + \frac{q^2 \kappa k_{\perp}^2}{2(2\kappa + q)(4k_{\perp}^2 + q^2)(\kappa^2 + k_{\perp}^2)^2} + \frac{a}{4q} + \frac{qa}{8(4k_{\perp}^2 + q^2)} \right\}, \end{aligned} \quad (39)$$

где

$$\xi = \frac{4k_{\perp}^2}{(2\kappa + q)(4k_{\perp}^2 + q^2)} \left[1 + \frac{q(2\kappa + q)}{4(\kappa^2 + k_{\perp}^2)} \right],$$

$$\begin{aligned} D &= \left[\frac{1 - e^{-qa}}{q} + \frac{q e^{-qa} (\kappa^2 - k_{\perp}^2)}{(4k_{\perp}^2 + q^2)(\kappa^2 + k_{\perp}^2)} \right. \\ &\left. + \frac{q k_{\perp}^2}{2\kappa(2\kappa + q)(\kappa^2 + k_{\perp}^2)} \right]. \end{aligned}$$

Ход зависимостей $F(q)$ показан на рисунке. Представляет интерес анализ следующих предельных случаев.

1. Проверим, что наше решение в некотором пределе сводится к яме, описываемой δ -функцией. Необходимо одновременно перейти к пределу $U_0 \rightarrow \infty$ и $a \rightarrow 0$, но при соблюдении условия $U_0 a^2 = \text{const}$. При этом у нас $k_{\perp} \rightarrow \infty$, а κ — конечно.

Тогда $\xi = 1/(2\kappa^2 + q^2)$ и формафактор равен

$$\begin{aligned} F(q) &= 2\kappa^2 \left\{ \frac{2}{(2\kappa + q)^2} + \left[\frac{q}{2\kappa(2\kappa + q)} \right] \frac{1}{(2\kappa + q)} \right\} \\ &= \frac{\kappa}{(2\kappa + q)} \left[1 + \frac{2\kappa}{(2\kappa + q)} \right], \end{aligned} \quad (40)$$

что с точностью до обозначений совпадает с (26), т. е. со случаем ямы в виде δ -функции.

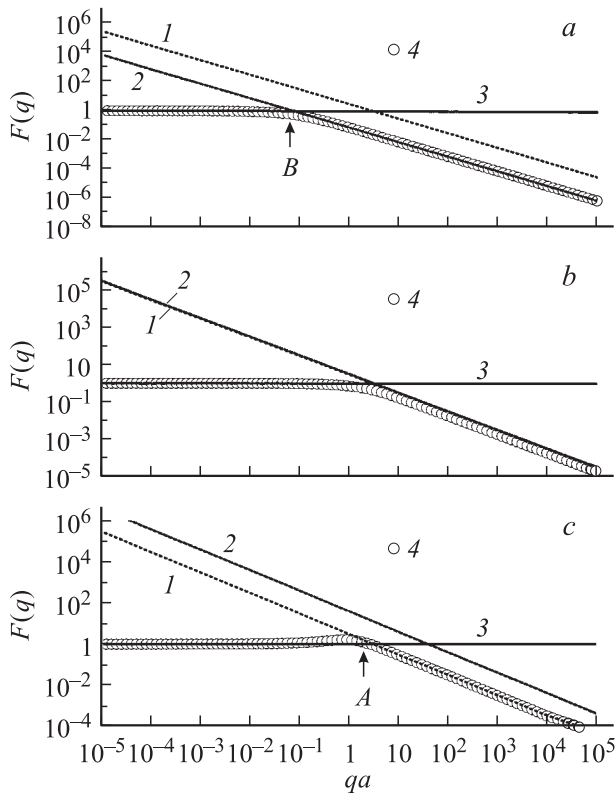
2. При стремлении высоты ямы к бесконечности, согласно (34), $\kappa \rightarrow \infty$, $\xi = 2k_{\perp}^2 / \kappa(4k_{\perp}^2 + q^2)$ и решение сводится к величине

$$\begin{aligned} F(q) &= \frac{8}{4\pi^2 + q^2 a^2} \\ &\times \left[\frac{3qa}{8} + \frac{\pi^2}{qa} - \frac{4\pi^4 (1 - e^{-qa})}{a^2 q^2 (4\pi^2 + q^2 a^2)} \right]. \end{aligned} \quad (41)$$

Это выражение для $F(q)$ совпадает с приведенными в работах [3,15].

Интересно рассмотреть соотношение (41) в двух предельных случаях.

а) $qa \ll 1$.



Зависимости формфактора $F(q)$ от волнового вектора q для потенциальной ямы конечной высоты, полученные при следующих параметрах: $U_0 = 0.5$ эВ, $m = 0.023m_0$ (символы 4). Ширина ямы, Å: $a = 7$, $b = 70$ и $c = 700$. Представлены расчеты по выражениям: 1 — (47), 2 — (49). Линия 3 соответствует значению $F(q) = 1$.

Раскладывая экспоненту в ряд до членов 2-го порядка малости, имеем

$$F(q \rightarrow 0) = \frac{8}{4k_{\perp}^2} \left[\frac{k_{\perp}^2}{aq} - \frac{4k_{\perp}^4(qa - q^2a^2/2)}{q^2a^24k_{\perp}^2} \right] = 1, \quad (42)$$

что в точности соответствует строго двумерному случаю. Это не является удивительным, если вспомнить, что, как и в строго двумерном случае, волновые функции задачи равны нулю во всем пространстве, кроме плоскости (в строго двумерном случае) или бесконечно тонкой квантовой ямы (в случае, рассмотренном в данном разделе).

б) $qa \gg 1$.

В этом случае

$$F(q \rightarrow \infty) = \frac{8}{q^2} \left[\frac{3q}{8a} \right], \quad (43)$$

а диэлектрическая проницаемость равна

$$\varepsilon(\omega, q \rightarrow \infty) = 1 - \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \frac{6\pi e^2}{aSq^2} \Upsilon. \quad (44)$$

Видим, что с точностью до численного множителя полученное выражение соответствует объемному случаю.

Как видим, условие перехода диэлектрической проницаемости к „двумерной“ зависимости от волнового вектора заключается в том, что характерный размер фурье-компоненты потенциала ($1/q$) в направлении z превышает размер волновой функции, который в данном случае равен просто a .

Вернемся к анализу выражения (39) и рассмотрим следующие случаи.

3. $qa \ll 1$.

В этом случае $\xi = 1/2\kappa$. В выражении (39) после разложения экспонент по малому параметру qa останутся следующие члены:

$$F(q) = \frac{2\kappa^2}{\left[1 + \frac{1}{2}\kappa a\right]^2} \left\{ \frac{2}{(2\kappa)^2} \frac{a}{2\kappa} - \frac{qa - (qa)^2/2}{q^2a} + \frac{a}{4q} \right\} \\ = \frac{1}{2\left[1 + \frac{1}{2}\kappa a\right]^2} \left[2 + 2\kappa a + \frac{(\kappa a)^2}{2} \right] = 1, \quad (45)$$

что в точности соответствует строго двумерному случаю (см. рисунок).

4. $qa \gg 1$.

В этом случае $\xi \propto 1/q$ и члены, содержащие ξ , вклада в (39) не дадут. Выражение для формфактора принимает вид

$$F(q) = \frac{\kappa}{q\left[1 + \frac{1}{2}\kappa a\right]^2} \left[1 + \frac{3\kappa a}{4} + \frac{\kappa^2}{2(\kappa^2 + k_{\perp}^2)} \right]. \quad (46)$$

Видно, что зависимость $F(q)$ качественно соответствует трехмерному случаю. Чтобы лучше ее понять, рассмотрим для (46) два следующих предельных случая.

а) $\kappa a \gg 1$.

В этом случае $a \gg 1/\kappa$, т.е. характерный размер волновой функции определяется шириной квантовой ямы a . Формфактор равен

$$F(q) = \frac{3}{qa}. \quad (47)$$

Точка A перехода между этим участком и участком с линейной зависимостью от q (см. рисунок, c) определяется соотношением

$$qa = \frac{3}{a}. \quad (48)$$

Физический смысл такого перехода понятен. Поскольку в рассматриваемом случае пространственный размер волновой функции близок к ширине ямы a , переход к зависимости, характерной для низкоразмерного случая, наступает, когда пространственный размер фурье-компоненты потенциала $1/q$ превышает a .

б) $\kappa a \ll 1$.

В этом случае $a \ll 1/\kappa$, яма очень узка и энергия уровня квантования E близка к U_0 , а следовательно, согласно (34) и (35) $k_{\perp} \gg \kappa$. Следовательно, формфактор равен

$$F(q) = \frac{\kappa}{q}. \quad (49)$$

Точка B (рисунок, a) перехода между этим участком и участком с линейной зависимостью от q определяется соотношением

$$q_B = \kappa, \quad (50)$$

Физический смысл такого перехода также очевиден. Поскольку в рассматриваемом случае низкой и узкой ямы пространственный размер волновой функции в смысле ее протяженности определяется параметром $1/\kappa$, переход к зависимости, характерной для низкоразмерного случая, наступает, когда пространственный размер фурье-компоненты потенциала $1/q$ превышает $1/\kappa$.

Следует отметить, что при $\kappa a \simeq 1$ (см. рисунок, b) зависимость $F(q)$ не сводится к выражениям (47) и (49), и следует пользоваться выражением (46).

5. Заключение

В работе проанализированы выражения для диэлектрической проницаемости в случае квазидвумерных квантовых структур на примере прямоугольной ямы с бесконечно высокими стенками, ямы в виде δ -функции и прямоугольной ямы с барьерами конечной глубины, причем аналитические выражения для двух последних случаев получены впервые. Проведено сравнение полученных результатов со случаями строго двумерного и строго трехмерного электронного газа. Продемонстрировано, что ход зависимости фурье-компоненты диэлектрической проницаемости от волнового вектора q определяется характерным размером потенциала $1/q$ и размером волновой функции в направлении ограничения размерности.

Работа выполнена при поддержке Программы фундаментальных исследований президиума РАН „Квантовые наноструктуры“ и грантов РФФИ № 04-07-90148 и 05-02-16679.

Список литературы

- [1] A. Wierling, H. Reinholz, G. Röpke, J. Adams. *Contrib. Plasma Phys.*, **45**, 441 (2005).
- [2] S.S. Sokolov, N. Studart. *Phys. Rev. B*, **68**, 195 403 (2003).
- [3] M. Vallone. *J. Appl. Phys.*, **91**, 9848 (2002).
- [4] A. Marcos, R.S. Tavares, G.-Q. Hai, S. Das Sarma. *Phys. Rev. B*, **64**, 045 325 (2001).
- [5] K. León-Monzón, H. Rodríguez-Coppola, V.R. Velasco, F. Garsia-Moliner. *J. Phys: Cond. Matter*, **8**, 665 (1996).
- [6] М.М. Бредов, В.В. Румянцев, И.Н. Топтыгин. *Классическая электродинамика* (М., Наука, 1985).
- [7] Н.С. Рытова. *Вест. МГУ*, № 3, 30 (1967).
- [8] M. Asada. *IEEE, J. Quant. Electron.*, **25**, 2019 (1989).
- [9] H.C. Schneider, W.W. Chow, S.W. Koch. *Phys. Rev. B*, **64**, 115 315 (2001).
- [10] И.А. Костко, Н.А. Гунько, Н.Л. Баженов, К.Д. Мынбаев, Г.Г. Зегря. *ФТП*, **40**, 488 (2006).
- [11] H. Ehrenreich, M.H. Cohen. *Phys. Rev.*, **115**, 786 (1959).

- [12] Т. Андо, А. Фаулер, Ф. Стерн. *Электронные свойства двумерных систем* (М., Мир, 1985).
- [13] В.М. Галицкий, Б.М. Карнаков, В.И. Коган. *Задачи по квантовой механике* (М., Наука, 1992).
- [14] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. *Квантовая механика. Нерелятивистская теория* (М., Наука, 1974).
- [15] J. Serge, A. Ghazali, A. Gold. *Phys. Rev. B*, **39**, 8499 (1989).

Редактор Т.А. Полянская

A dielectric function in semiconductor quasi-2D nanostructures

N.L. Bazhenov, K.D. Mynbaev, G.G. Zegrya

Ioffe Physicotechnical Institute,
Russian Academy of Sciences,
194021 St. Petersburg, Russia

Abstract Spatial and time dependences of a dielectric function for the case of the electron gas in quasi-2D nanostructures was studied. For the first time, analytic expressions for the dielectric function were derived for a quantum well the δ -function shape and for a rectangular well with finite potential barriers. Validity criteria of strictly 2D and 3D cases have been obtained.