

РЕШЕНИЕ САМОСОГЛАСОВАННЫХ УРАВНЕНИЙ КОНА – ШЭМА И ПУАССОНА ДЛЯ КВАЗИДВУМЕРНОГО ЭЛЕКТРОННОГО ГАЗА В ОБОГАЩЕННОМ СЛОЕ ПОЛУПРОВОДНИКА С НЕПАРАБОЛИЧЕСКОЙ ЗОНОЙ ПРОВОДИМОСТИ

А. Я. Шульман^{*}, *Д. В. Посвянский*^{**}

*Институт радиотехники и электроники им. В. А. Котельникова Российской академии наук
125009, Москва, Россия*

Поступила в редакцию 30 декабря 2019 г.,
после переработки 30 декабря 2019 г.
Принята к публикации 9 января 2020 г.

Предложенный ранее метод самосогласованного решения системы уравнений Кона–Шэма и Пуассона обобщен на случай большой плотности электронов, локализованных вблизи поверхности вследствие размерного квантования электронного спектра в потенциальной яме области загиба зон. Получено полностью самосогласованное итеративное решение для квазидвумерного электронного газа в обогащенном слое на поверхности полупроводника с вырожденным электронным газом в объеме. Рассмотрены случаи параболического и непараболического энергетического спектра электронов проводимости. Для параболической зоны проводимости представлены пространственные распределения электронной плотности и электростатического потенциала, энергии уровней размерного квантования и их зависимость от глубины приповерхностной потенциальной ямы. Выявлено значительное уменьшение плотности трехмерных электронов в области обогащенного слоя, занятой квазидвумерным электронным газом. Рассчитаны зависимости избыточной поверхностной плотности электронов и емкости структуры от потенциала поверхности. Результаты представлены в безразмерной форме, что позволяет полуколичественно оценивать параметры обогащенных слоев по известным уровню легирования и величине загиба зон. В случае непараболической зоны проводимости из-за конечной ширины запрещенной зоны спектр квазидвумерного электронного газа получен в двухзонном приближении Франца–Кейна решением задачи на собственные значения для нового однозонного уравнения метода эффективной массы. Установлено, что плотность состояний и эффективная масса электронов в двумерных подзонах линейно растут с энергией. Выведена формула, которая аналитически аппроксимирует рассчитанный энергетический спектр. Найденные положение, дисперсия энергетического спектра и зависимость эффективной массы от энергии для подзон размерного квантования согласуются с опубликованными результатами прямых измерений свойств квазидвумерных электронов на поверхности n -InAs, полученных методами фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением и магнитотуннельной спектроскопии. Рассмотрены условия, при которых непараболическость зоны проводимости делает возможным поглощение квазидвумерными электронами нормально падающего излучения за счет межподзонных переходов.

DOI: 10.31857/S0044451020060097

1. ВВЕДЕНИЕ

Метод функционала плотности в приближении Кона–Шэма широко используется при изучении

свойств многоэлектронных систем. В случае неограниченного электронного газа он сводится к системе уравнений для одночастичных орбиталей и самосогласованного поля, которая должна удовлетворяться согласованными распределениями плотности электронов $N(\mathbf{r})$ и электростатического потенциала $\phi(\mathbf{r})$. Ввиду существенной нелинейности этой системы уравнений одним из методов построения самосогласованного решения является итеративный спо-

^{*} E-mail: ash@cplire.ru

^{**} E-mail: dimitrii.posvyanski@gmail.com

соб, при котором надо поочередно решать уравнение Пуассона для потенциальной энергии электрона $U(\mathbf{r}) = -e\phi(\mathbf{r})$ и уравнение Шредингера для одночастичных волновых функций в эффективном потенциале $U_{eff}(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r}) + U_{xc}(\mathbf{r})$, где U_{xc} — обменно-корреляционный потенциал.

Возникающие в ряде случаев неустойчивость или даже расходимость итерационного процесса, когда пространственно-неоднородное распределение $N(\mathbf{r})$ электронов, сформированное из решений уравнения Шредингера, не удовлетворяет условиям совместности с граничными условиями к уравнению Пуассона, особенно существенно проявляются в случае неограниченных систем [1]. Представленные в литературе методы преодоления этой трудности, по существу, сводятся к отказу от первоначально сформулированного итеративного способа решения и замене его какой-либо приближенной схемой расчета, которая обычно строится полуэмпирически и не позволяет оценить степень отклонения от точного решения (см. обсуждение в работах [1, 2]).

В работе [1] был предложен метод решения уравнений Кона–Шэма, обеспечивающий сходимость итерационного процесса в рамках исходной постановки задачи. Основная идея этого метода состоит в том, что полная электронная плотность в уравнении Пуассона представляется в виде суммы двух слагаемых,

$$N(\mathbf{r}) = N_{ind}(U_{eff}(\mathbf{r})) + N_{qu}(\mathbf{r}),$$

первое из которых связано с самосогласованным потенциалом $U_{eff}(\mathbf{r})$ известным квазиклассическим выражением, а второе определяется квантовомеханической динамикой электронов. Введение величины $N_{ind}(U_{eff}(\mathbf{r}))$ реализует самосогласованное экранирование крупномасштабных неоднородностей заряда при решении уравнения Пуассона. Это устраняет кулоновское дальнеедействие, которое является причиной жесткой связи между распределением заряда и граничными условиями к уравнению Пуассона.

В работе [2] предложенный алгоритм был реализован и применен, в частности, для расчета энергии предсказанных в работе Константинова и Шика [3], а также независимо чуть позже в работе Апельбаума и Бараффа [4] состояний электронов, которые локализованы вблизи поверхности металл–вакуум при нулевом внешнем электрическом поле в самоиндуцированной потенциальной яме. В этом случае энергетические уровни оказались достаточно мелкими по сравнению с энергией Ферми свободных носителей и, как следствие, плотность локализованно-

го на них заряда $-eN_{2D}(\mathbf{r})$ была сравнима с плотностью заряда от электронов в состояниях непрерывного спектра (см. рис. 2б в работе [2]). В случае полупроводника потенциальная яма на границе полупроводник–вакуум и энергетические уровни в ней могут стать весьма глубокими при, например, наложении внешнего электрического поля \mathcal{E} . Соответственно, вблизи поверхности плотность квазидвумерных электронов может значительно превзойти плотность электронов непрерывного спектра.

Такая ситуация реализуется в легированных полупроводниковых структурах n -типа с обогащенным слоем на поверхности, когда заняты как состояния квазидвумерного электронного газа в размерно-квантованных подзонах, так и состояния непрерывного спектра трехмерного электронного газа с заданным значением энергии Ферми в объеме. Поэтому при самосогласованном расчете энергетического спектра электронов в таких структурах все основные трудности, характерные для бесконечных многоэлектронных систем, проявляются в полном объеме: 1) проблема нормировки волновых функций непрерывного спектра; 2) обеспечение совместности краевых условий к уравнению Пуассона с распределением электронной плотности, получаемой на каждом итерационном цикле после решения уравнения Шредингера [1].

В связи с этим возникает вопрос, сможет ли алгоритм расчета, основанный на квазиклассической связи между потенциалом и трехмерной плотностью электронов и не учитывающий квантование энергетического спектра последних, обеспечить сходимость итерационного процесса в случае, когда доля квантового заряда N_{qu} в системе становится преобладающей в некоторой ограниченной области пространства.

Поскольку при нашем подходе сходимость итераций означает, что получено точное самосогласованное решение, представляло также интерес сравнить найденный энергетический спектр и другие характеристики квазидвумерного электронного газа с результатами измерений, чтобы оценить применимость приближения самосогласованного поля для количественного описания таких объектов.

Для ответа на эти вопросы вычисления энергетического спектра и волновых функций, описанные в разд. 2, были выполнены с параметрами полупроводниковых структур, аналогичных n -InAs с обогащенным слоем на поверхности полупроводника. Этот выбор стимулировался работами Цуи [5–7], в которых для большого набора туннельных переходов Pb/PbO/ n -InAs было экспериментально не

только обнаружено существование квазидвумерного электронного газа на поверхности полупроводника, но и методом магнитотуннельной спектроскопии измерены зависимость эффективной массы m^* квазидвумерных электронов от энергии, а также вольт-емкостные характеристики. Кроме того, в более поздних работах [8, 9] энергетический спектр квазидвумерного электронного газа на поверхности n -InAs исследовался методом фотоэлектронной спектроскопии. Экспериментальные результаты, полученные последним способом, более удобны для сравнения с расчетными положениями уровней размерного квантования, так как в процессе измерения нет перестройки потенциальной ямы и сопутствующего сдвига уровней, что имеет место в методе туннельной спектроскопии, когда меняется падение напряжения на структуре.

Представленные в разд. 3 результаты вычислений для параболической зоны проводимости дали возможность полуколичественно сравнить с данными измерений спектр квазидвумерного электронного газа, а также рассчитать зависимость числа и положения подзон размерного квантования, поверхностной плотности избыточного заряда и емкости обогащенного слоя от величины загиба зон.

Однако реальные структуры с конечной шириной E_g запрещенной зоны полупроводника часто имеют на поверхности потенциальную яму, глубина которой сравнима с E_g . При этом, чтобы получить количественные результаты, пригодные для анализа экспериментальных данных, или рассчитать параметры полупроводниковой структуры с нужными характеристиками квазидвумерного электронного газа, необходимо проводить вычисления с учетом влияния соседних зон. В разд. 4 настоящей работы алгоритм самосогласованных итераций обобщен на случай двухзонного приближения для непараболического изотропного закона дисперсии электронов в зоне проводимости. Проведены необходимые изменения уравнения эффективной массы и уравнения Пуассона. Численным дифференцированием полученного энергетического спектра рассчитаны такие характеристики квазидвумерного электронного газа, как зависимость плотности состояний и эффективной массы m^* от энергии E . Результаты вычислений количественно сравниваются с экспериментальным энергетическим спектром электронов в размерно-квантованной подзоне, измеренным на образцах n -InAs методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением [8], и с зависимостью $m^*(E)$, полученной Цуи методом магнитотуннельной спектроскопии [6].

Важно еще, что фотоэлектронная спектроскопия позволяет определить также положение дна зоны проводимости на поверхности полупроводника относительно уровня Ферми и, следовательно, глубину потенциальной ямы. Поэтому сопоставление рассчитанного энергетического спектра с результатами измерений спектра фотоэлектронов [8, 9] может быть проведено без единого свободного параметра в теории, чего нельзя было достичь в случае экспериментальных данных Цуи [6], когда точная величина падения потенциала на обогащенном слое была неизвестна из-за неопределенности характеристик изолирующего слоя окисла свинца на поверхности образцов.

Расчеты проводились как в приближении самосогласованного потенциала Хартри, так и с учетом обменно-корреляционного потенциала в приближении локальной плотности при значениях эффективного радиуса Вигнера–Зейтца R_s^* , типичных для полупроводниковых структур. Это позволило оценить влияние обменно-корреляционного взаимодействия на электронный спектр в структурах с обогащенным слоем.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Для иллюстрации на рис. 1 показаны потенциальная яма вблизи поверхности полупроводника, энергии минимумов соответствующих размерно-квантованных подзон и волновые функции этих состояний, полученные в результате самосогласованного расчета. Существенно, что заданный легированием уровень Ферми E_F полупроводника находится выше дна зоны проводимости в объеме, вследствие чего заполненные состояния непрерывного спектра также дают вклад в плотность электронов в области квантовой ямы. Положение уровня Ферми фиксировано требованием локальной нейтральности объема полупроводника в бесконечно удаленной области, что определяет заполнение подзон размерного квантования и плотность делокализованного заряда в каждой итерации.

В таких полубесконечных системах обычная схема итеративного решения может приводить на каком-то шаге к несовместности полученного распределения электронов с любым типом заданных краевых условий к уравнению Пуассона. Если краевые условия к уравнению Пуассона образованы заданием величины электрического поля $\mathcal{E}(0)$ на поверхности полупроводника и требованием $\mathcal{E}(z \rightarrow \infty) = 0$, так как на бесконечности всегда

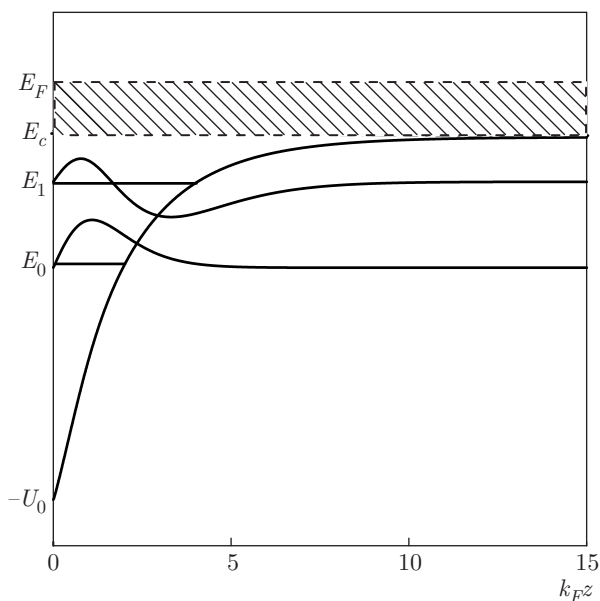


Рис. 1. Потенциал квантовой ямы, положение минимумов двух подзон и соответствующие им волновые функции. Метка E_c отмечает положение дна зоны проводимости в объеме, U_0 — загиб зон на поверхности

предполагается локальная нейтральность электронного газа, то в результате решения уравнения Шредингера при очередной итерации в полупроводнике может образоваться полный электронный заряд, который не совместен с заданной разностью значений электрического поля на поверхности и в объеме. В обычно используемой схеме итерационного решения в этот момент применяют различные приемы, чтобы избежать нарушения теоремы Гаусса и получить решение уравнения Пуассона. Подправляют руками либо найденную плотность электронов, либо уровень легирования в объеме.

Если задается значение $U(0)$ потенциала на поверхности относительно выбранного за нуль значения потенциала на бесконечности, то в этом случае распределение $N^{(i)}(z)$ электронов, полученное решением уравнения Шредингера на i -м шаге итераций, должно удовлетворять теореме о дипольном моменте (см. [1], Sec. 2 Eq. (9), Sec. 4.2 Eq. (48)), которая требует, чтобы разность потенциалов $U(0) - U(\infty)$ между поверхностью и бесконечностью равнялась рассчитанному относительно поверхности дипольному моменту полученного распределения заряда.

Ясно, что в любом из двух случаев при произвольном распределении плотности заряда в пространстве решение уравнения Пуассона не существует. В то же время при решении уравнения Шредингера

краевые условия к уравнению Пуассона никак учтены быть не могут и не учитываются. Следовательно, до получения самосогласованного точного решения распределение электронов $N^{(i)}(z)$, найденное на i -м шаге итераций, только случайно может оказаться совместным с граничными условиями к уравнению Пуассона. Из-за наличия свободных носителей заряда в объеме полупроводника задача об обогащенном слое представляет большие трудности при обычных итерационных схемах решения, чем задача с инверсионным слоем. Например, она исключена из обсуждения в известном обзоре электронных свойств двумерных систем [10].

В литературе встречаются две основные схемы борьбы с описанной проблемой при расчете энергетического спектра квазидвумерного электронного газа в квантовых ямах на поверхности полупроводников. Применительно к структурам с инверсионным слоем, где нет подвижных носителей заряда в объеме (или ими пренебрегают), схема была разработана Стерном [11, 12]. Ключевым моментом этой схемы служит использование на входе очередного итерационного цикла вместо полученного к этому моменту результата его линейной комбинации с несколькими предыдущими. Весовые коэффициенты такой линейной комбинации подбираются из соображений баланса между устойчивостью сходимости и длительностью расчета. Под устойчивостью при этом понимают уменьшение разности между очередным результатом на выходе и заданным значением на входе. Существенно отметить, что, как правило, последний полученный выход добавляется в линейную комбинацию с коэффициентом, заметно меньшим единицы. Иллюзорность надежды обойти таким образом невозможность решить уравнение Пуассона при нарушении условий совместности отмечалась в работе [1].

Для структур с обогащенным слоем применяется подход Апфельбаума – Бараффа [4, 13], в котором вместо точного решения уравнения Пуассона вводится трехпараметрическое представление для потенциала и расчет сводится к отысканию этих параметров. Несмотря на фактический отказ от точного решения задачи, этот подход также не обеспечивает автоматического выполнения краевых условий к уравнению Пуассона в процессе самосогласования (см. например, текст после формулы (5.9) в работе [13] и замечание после формулы (2.19) в [14]).

Вторая трудность в задаче об энергетическом спектре электронов в обогащенном слое связана с необходимостью обеспечить нормировку волновых функций непрерывного спектра на дельта-функцию

от квантовых чисел для неоднородной системы, когда нельзя накладывать периодические граничные условия Борна–Кармана. Одним из приемов в таких случаях служит сведение задачи о полубесконечном полупроводнике к задаче о достаточно толстой пластине с нулевыми или периодически граничными условиями для волновых функций и квазидискретным энергетическим спектром электронов. Возникающие при этом сложности с явным отысканием спектра и нормировочных констант были обойдены, например в работе [13] с помощью предположения (3.2) и частного искусственного приема (3.11) с неясными условиями применимости. Это позволило исключить из ответа неопределенные нормировочные константы и плотность уровней квазидискретного спектра неоднородной толстой пластины.

Однако сходимость простого итерационного процесса при такой постановке возможна только для нейтральной пластины с симметричными краевыми условиями к уравнению Пуассона, когда равны нулю полный заряд и полный дипольный момент структуры (см. Примечание 9 в работе [13]). При периодических граничных условиях и несоблюдении указанных требований возникают ошибки из-за взаимодействия зарядов или дипольных моментов периодически повторяющихся реплик исходной пластины (см., например, работы [15–19]). Другие минусы геометрии пластины при расчете спектра поверхностных состояний отмечаются, например, в работе [20]. Обсуждение современного состояния аналогичных проблем, возникающих при замене бесконечного кристалла с заряженным дефектом сверхъячейкой конечного объема с периодическими граничными условиями, а также оценки способов преодоления возникающих ошибок можно найти в работе [21].

Недостатки известных решений для полубесконечного электронного газа были обсуждены ранее [1, 2] вместе с предложенным в работе [1] способом их устранения за счет введения нелинейного экранирования в уравнение Пуассона и конструктивного определения скалярного произведения для волновых функций непрерывного спектра. Математический аппарат введенного таким образом обобщенного гильбертова пространства также оказался существенно необходим в случае непараболической зоны проводимости при выводе однозонного уравнения эффективной массы и интерпретации его решений [22].

Следует отметить, что за истекшее с 70-х гг. время для расчета полупроводниковых структур был предложен ряд вычислительных подходов, в кото-

рых в той или иной форме используется модификация уравнения Пуассона, позволяющая при его решении находить одновременно поправки к потенциалу и к распределению электронов [23–26]. Однако используемые при этом формулы для индуцированной плотности электронов получены в упрощающих предположениях и без оценки вносимой ошибки. Более того, самосогласованно решается только модифицированное уравнение Томаса–Ферми. Влияние заполнения электронами полученного квазидвумерного спектра на самосогласованность не рассматривается. Поэтому в этих методах нет возможности оценивать степень отклонения найденного решения от точного, если нет независимо полученного точного решения конкретной задачи.

В работах [8, 9] также проводится сравнение экспериментальных данных для поверхности n -InAs с самосогласованными расчетами энергетического спектра в параболическом приближении. Однако, как будет показано, в случае n -InAs использование параболического закона дисперсии для электронов проводимости дает слишком грубое описание спектра квазидвумерных электронов. Кроме того, в этих статьях отсутствует существенная информация о способах преодоления перечисленных выше известных трудностей самосогласованного итерационного расчета.

Можно лишь предположить, что упоминание в работе [9] нелинейного уравнения Пуассона означает учет в приближении Томаса–Ферми распределения свободных дырок в потенциальном поле квантовой ямы [27]. Однако все расчеты в работе [9] сделаны для комнатной температуры, потому что при температуре 80 К и указанных в этой работе параметрах полупроводника экранирующее действие дырок ничтожно и не могло бы обеспечить сходимость итераций. В работе [8], судя по ссылке, использовался метод, основанный на представлении рассматриваемой системы пластиной конечной толщины, который имеет свои известные недостатки [2, 20, 21]. Поэтому представленные в работах [8, 9] результаты теоретических расчетов обсуждаться не будут, так как отсутствует информация, необходимая для независимого их воспроизведения и оценки надежности (см. обсуждение этого критерия в [28], Sec. 9).

Целью настоящей работы было дальнейшее развитие метода самосогласованного итерационного расчета основного состояния многоэлектронных систем применительно к особенностям полупроводниковых структур с квазидвумерным электронным газом. В рамках принятой модели полупроводника выполнен точный расчет энергетического спектра

электронов в обогащенном слое на поверхности¹⁾. Сравнение с результатами измерений должно показать, насколько хорошо модель описывает реальные структуры. Обнаруживаемые различия будут свидетельствовать о необходимости либо повысить точность измерений, либо уточнить значения параметров полупроводника, либо основывать анализ на более детальном математическом описании исследуемого явления.

Учет непараболичности энергетического спектра для состояний в зоне проводимости, который необходим для корректного сравнения результатов расчета с экспериментальными данными в случае полупроводников с узкой запрещенной зоной, вносит дополнительные усложнения, которые связаны с изменением как уравнения для одночастичных собственных функций, так и формулы для индуцированного заряда в уравнении Пуассона. В основу расчета, вместо обычно используемой многозонной системы уравнений для огибающих функций в базисе Латтинжера – Кона, положено уравнение метода эффективной массы для зоны проводимости, которое получается из двухзонного дисперсионного уравнения Франца – Кэйна

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = E \left(1 + \frac{E}{E_g} \right) \quad (2.1)$$

путем замены $\mathbf{k} \rightarrow -i\nabla_{\mathbf{r}}$, $E \rightarrow E - U_{eff}$. Здесь \mathbf{k} – квазиимпульс, $E \geq 0$ – энергия состояния в зоне проводимости, U_{eff} – эффективный потенциал, равный сумме электростатического U и обменно-корреляционного U_{xc} потенциалов. Формула (2.1) была предложена Францем ([31], §27) из эвристических соображений в виде

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m^*} = T \left(1 + \frac{T}{E_g} \right), \quad (2.2)$$

где $T = E - U$ – кинетическая энергия состояния, принадлежащего зоне проводимости при $T \geq 0$ и валентной зоне при $T \leq -E_g$. Кэйн [32] получил дисперсионное уравнение (2.1) в рамках kp -теории зонной структуры.

Квазиклассическое приближение для решения волнового уравнения, соответствующего формуле (2.2), использовалось при анализе межзонного туннелирования в задаче о пробое диэлектриков ([31], §29), в расчетах вольт-амперных характеристик туннельных p - n -переходов [33] и туннельных переходов металл-полупроводник с барьером Шоттки

¹⁾ Предварительные результаты были представлены ранее [29, 30].

Au/ n -GaAs [34–38]. В последних работах было показано, что только при учете непараболичности зоны проводимости можно получить количественное описание туннельных вольт-амперных характеристик.

Квазиклассическое уравнение Томаса – Ферми для случая электронного газа с непараболическим спектром вида (2.1) также использовалось для расчета свойств квазидвумерного электронного газа в обогащенном слое [39]. Однако наличие дискретного спектра размерно-квантованных поверхностных состояний и нулевое граничное условие для волновых функций, что невозможно учесть в приближении Томаса – Ферми, требуют полного решения квантовомеханической задачи.

Этому вопросу посвящен разд. 4 настоящей работы, в котором рассчитанный энергетический спектр квазидвумерного электронного газа в обогащенном слое n -InAs сопоставляется с результатами прямых измерений спектра методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением [8] и с экспериментальной зависимостью от энергии эффективной массы квазидвумерных электронов [6]. Обоснование однозонного уравнения эффективной массы для непараболической зоны проводимости, интерпретация решений и условия применимости рассмотрены отдельно в работе [22] на базе kp -теории Кэйна [32] и подхода, намеченного Келдышем [40].

3. ПАРАБОЛИЧЕСКИЙ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР ЭЛЕКТРОНОВ ПРОВОДИМОСТИ

3.1. Основные уравнения

В приближении Кона – Шэма газ взаимодействующих электронов при температуре $T = 0$ описывается системой уравнений для одночастичных волновых функций Ψ_E :

$$\frac{1}{2} \nabla^2 \Psi_E(\mathbf{r}) + [E - U_{eff}(\mathbf{r})] \Psi_E(\mathbf{r}) = 0 \quad (3.1)$$

с эффективным потенциалом

$$U_{eff}(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r}) + U_{xc}(\mathbf{r}). \quad (3.2)$$

Здесь собственное значение E – энергия одночастичного состояния, $U_{xc} = U_x + U_c$ – обменно-корреляционный потенциал, U – электростатическая потенциальная энергия электрона, для которой уравнение Пуассона записывается в виде

$$\nabla^2 U = 4\pi [N_+(\mathbf{r}) - N(\mathbf{r})], \quad (3.3)$$

где $N_+(\mathbf{r})$ – плотность положительного фона, $N(\mathbf{r})$ – плотность электронов. Начало отсчета

шкалы энергий выбирается так, что $U(\infty) = 0$. В случае полупроводников уравнение (3.1) — это уравнение метода эффективной массы для зоны проводимости.

Здесь и далее, пока не оговорено иное, будут использованы эффективные атомные единицы (а. е. *) $e^* = m_e^* = \hbar = 1$. Они связаны со стандартными единицами соотношениями

$$e^{*2} = \frac{e^2}{\varkappa}, \quad m_e^* = m_c^* m_e, \quad a_B^* = a_B \frac{\varkappa}{m_c^*}, \quad (3.4)$$

$$Na^* = Na \frac{m_c^*}{\varkappa^2},$$

где e и m_e — элементарный заряд и масса свободного электрона, m_c^* — эффективная масса электронов на дне зоны проводимости, \varkappa — решеточная диэлектрическая постоянная полупроводника. При численных оценках использованы значения $a_B = 0.529 \text{ \AA}$ для боровского радиуса и $Na = 27.2 \text{ эВ}$ для единицы энергии Хартри.

Обменный потенциал для электронного газа в локальном приближении дается известной формулой

$$U_x(\mathbf{r}) = - \left(\frac{3}{\pi} \right)^{1/3} N^{1/3}(\mathbf{r}) = - \left(\frac{3}{2\pi} \right)^{2/3} \frac{1}{r_s^*(\mathbf{r})}. \quad (3.5)$$

Необходимая для расчета обменно-корреляционного потенциала U_{xc} корреляционная энергия, как и в работе [2], берется в виде

$$E_c = - \frac{0.44}{r_s^* + 11.5}. \quad (3.6)$$

Здесь $r_s^*(\mathbf{r})$ — локальный радиус Вигнера–Зейтца, определяемый соотношением

$$4\pi r_s^{*3}(\mathbf{r})/3 = N^{-1}(\mathbf{r}). \quad (3.7)$$

Его предельное значение в объеме полупроводника обозначим через

$$R_s^* \equiv R_s(m_c^*/\varkappa) = r_s^*(\infty).$$

Электронная плотность выражается через волновые функции формулой

$$N(\mathbf{r}) = 2 \int_{E \leq E_F} \mathfrak{D}\{E\} |\Psi_E(\mathbf{r})|^2, \quad (3.8)$$

где множитель 2 учитывает спиновое вырождение одночастичных состояний и интегрирование по дифференциальной спектральной мере $\mathfrak{D}\{E\}$ гамильтониана $\hat{H} = -\frac{1}{2}\nabla^2 + U_{eff}(\mathbf{r})$ ведется по всем занятым

состояниям с энергией E , не превышающей энергию Ферми E_F , включая размерно-квантованные подзоны. Энергия Ферми связана с плотностью электронов в нейтральной области на бесконечности формулой

$$E_F = \frac{1}{2} k_F^2(N_+) + U_{xc}(N_+), \quad (3.9)$$

где $k_F(N_+) = (3\pi^2 N_+)^{1/3} = (9\pi/4)^{1/3} R_s^{*-1}$ — фермиевский волновой вектор в эффективных атомных единицах ($a_B^* = 1$).

Как отмечалось во Введении, краевые условия к уравнению Пуассона накладывают определенные требования на распределение электронной плотности в пространстве, которым результат интегрирования по формуле (3.8) не обязан удовлетворять, пока не достигнуто самосогласование. В используемом методе решения системы уравнений (3.1) и (3.3) полная электронная плотность в уравнении (3.3) представляется в виде суммы:

$$N(\mathbf{r}) = N_{ind}(U_{eff}(\mathbf{r})) + N_{qu}(\mathbf{r}), \quad (3.10)$$

где индуцированная плотность N_{ind} зависит от неизвестного потенциала, что снимает проблему несовместности краевых условий и правой части уравнения Пуассона. В квазиклассическом приближении потенциал и N_{ind} связаны формулой

$$N_{ind}(\mathbf{r}) = \frac{2^{3/2}}{3\pi^2} [E_F - U_{eff}(\mathbf{r})]^{3/2} = \frac{2^{3/2}}{3\pi^2} (E_F - U(\mathbf{r}) - U_{xc}(N(\mathbf{r})))^{3/2}, \quad (3.11)$$

где обменно-корреляционный потенциал берется в приближении локальной плотности. Для квантовой плотности электронов $N_{qu}(\mathbf{r})$, согласно выражениям (3.8) и (3.10), имеем

$$N_{qu}(\mathbf{r}) = 2 \int_{E \leq E_F} \mathfrak{D}\{E\} |\Psi_E(\mathbf{r})|^2 - N_{ind}(\mathbf{r}). \quad (3.12)$$

В случае обогащенного слоя помимо плотности квазидвумерного электронного газа в квантовую плотность входит мелкомасштабная часть плотности электронов непрерывного спектра, которая обусловлена квантовой динамикой электронов.

Уравнение Пуассона теперь записывается в виде

$$\nabla^2 U + 4\pi N_{ind}(U) = 4\pi [N_+(\mathbf{r}) - N_{qu}(\mathbf{r})], \quad (3.13)$$

где правая часть в каждом итерационном цикле известна и уже не связана требованием совместности с краевыми условиями. Функция $N_{ind}(U)$ потенциала

U в левой части нелинейного уравнения (3.13) в процессе пошагового решения находится линеаризацией ее от шага к шагу с использованием производной от обратной функции $U(N_{ind})$, которая легко получается из равенства (3.11). Подробнее детали этого этапа решения уравнения Пуассона описаны в конце разд. 2.1 и в разд. 2.2 работы [2], где аналогичная итеративная схема решения была использована для расчета энергии самоиндуцированных приповерхностных уровней в проводнике в отсутствие внешнего электрического поля.

В настоящей работе тот же алгоритм применяется для нахождения энергетических уровней, распределения самосогласованной электронной плотности и эффективного потенциала при наличии постоянного электрического поля, приложенного нормально к поверхности вырожденного полупроводника, или при нанесении положительного поверхностного заряда. Геометрия задачи показана выше на рис. 1.

Зная распределение плотности $N(z, V)$ электронов в пространстве при заданном падении напряжения V на структуре, можно вычислить дифференциальную электростатическую емкость на единицу площади системы. Она выражается через полный заряд Q в полупроводнике на единицу площади формулой

$$C(V) = -\frac{dQ}{dV} = \frac{dN_s}{dV}, \quad (3.14)$$

где $V = \phi(0) - \phi(\infty)$ — разность значений электростатического потенциала ϕ на поверхности и в объеме полупроводника, $Q = -N_s$ и

$$N_s(V) = \int_0^\infty dz [N(z, V) - N_+(z)]. \quad (3.15)$$

Здесь N_s — избыточная поверхностная плотность электронов, z — координата по оси, направленной нормально к поверхности в глубь полупроводника. Начало координат $z = 0$ выбрано на поверхности, координаты в плоскости поверхности обозначим \mathbf{r}_\parallel .

3.2. Детали самосогласованных вычислений

Придерживаясь обозначений работы [2], в дальнейшем будем использовать безразмерные величины для координаты $\zeta = k_F z$, волнового вектора $\tilde{\mathbf{k}} = \mathbf{k}/k_F$, плотности электронов $n(\zeta) = N(z)/N_+$, энергии $\varepsilon = E/E_F^0$ и потенциала $u(\zeta) = U(z)/E_F^0$, где $E_F^0 = k_F^2/2$. Плотность N_+ ионизованных доноров в полупроводнике считается не зависящей от z .

В безразмерных переменных уравнение Пуассона (3.13) запишется в виде

$$\frac{d^2 u}{d\zeta^2} + c_n n_{ind}(u) = c_n [1 - n_{qu}(\zeta)], \quad (3.16)$$

где $c_n = (8/3\pi)(4/9\pi)^{1/3} R_s^*$ и $0 \leq \zeta < \infty$. Краевые условия к уравнению Пуассона брались в виде

$$\left. \frac{du}{d\zeta} \right|_{\zeta=0} = \tilde{\mathcal{E}}, \quad \left. \frac{du}{d\zeta} \right|_{\zeta=\infty} = 0. \quad (3.17)$$

Здесь безразмерное электрическое поле $\tilde{\mathcal{E}} = \mathcal{E}/\mathcal{E}_c$ выражено в единицах характерного поля $\mathcal{E}_c = = k_F E_F^0/e$. Подставив E_F^0 в эВ, k_F в 1/см и положив $e = 1$, получим \mathcal{E}_c в В/см. При реальных вычислениях граничные условия из бесконечности переносились в точку $\zeta_{max} = 150$, что обеспечивало достаточную независимость получаемых результатов от дальнейшего увеличения ζ_{max} .

Положив в уравнении (3.1) $\mathbf{r} = (z, \mathbf{r}_\parallel)$, введем обозначение $\mathbf{k} = (k_z, \mathbf{k}_\parallel)$ для волнового вектора и представим решение в виде

$$\Psi_E(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi} \exp(i\mathbf{k}_\parallel \cdot \mathbf{r}_\parallel) \psi_{k_z}(z), \quad (3.18)$$

$$\frac{1}{2} k_z^2 = E - \frac{1}{2} k_\parallel^2 - U_{xc}(\infty).$$

Получаем отсюда уравнение Шредингера в безразмерных переменных для $\psi_{\tilde{k}_z}(\zeta)$ в виде

$$\frac{d^2 \psi_{\tilde{k}_z}(\zeta)}{d\zeta^2} + [\tilde{k}_z^2 - u_{eff}(\zeta) + u_{xc}(\infty)] \psi_{\tilde{k}_z}(\zeta) = 0 \quad (3.19)$$

с краевыми условиями для собственных состояний непрерывного спектра

$$\psi_{\tilde{k}_z}(0) = 0, \quad (3.20)$$

$$\psi_{\tilde{k}_z}(\zeta \rightarrow \infty) \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin(\tilde{k}_z \zeta + \gamma_{\tilde{k}_z}), \quad k_z > 0.$$

Множитель $\sqrt{2/\pi}$ при асимптотике решения в бесконечности обеспечивает нормировку собственных функций непрерывного спектра на $\delta(\tilde{\mathbf{k}} - \tilde{\mathbf{k}}_1)$. Через $\gamma_{\tilde{k}_z}$ обозначена фаза волновой функции в глубине полупроводника, где эффективный потенциал становится постоянным. Достаточные условия на скорость обращения в нуль разности $u_{eff}(\zeta) - u_{xc}(\infty)$, при которых асимптотика решений на бесконечности имеет вид (3.20), выведены, например, в [41] (Гл. III, § 9). Требуемая формулой (3.20) нормировка численно найденного решения $\psi_{\tilde{k}_z}(\zeta)$ однородно

го уравнения (3.19) обеспечивается умножением его на константу A , которая находится из уравнения²⁾

$$A^2 \left[\tilde{\psi}_{\tilde{k}_z}^2(\zeta) + \frac{1}{\tilde{k}_z^2} \left(\frac{d\tilde{\psi}_{\tilde{k}_z}}{d\zeta} \right)_\zeta^2 \right] = \frac{2}{\pi}, \quad (3.21)$$

$$\zeta \leq \zeta_{max}.$$

При необходимости знать фазу $\gamma_{\tilde{k}_z} \in (-\pi/2, \pi/2)$, она находится по формуле

$$\gamma_{\tilde{k}_z} = \text{arctg} \left(\frac{\tilde{k}_z \psi_{\tilde{k}_z}}{d\psi_{\tilde{k}_z}/d\zeta} \right)_\zeta - \tilde{k}_z \zeta + \left[\frac{\tilde{k}_z \zeta}{\pi} \right] \pi, \quad (3.22)$$

$$\zeta \leq \zeta_{max},$$

где $[a]$ обозначает целую часть числа $a > 0$.

Для волновых функций дискретных состояний, локализованных в приповерхностной потенциальной яме, граничные условия и условие нормировки имеют вид ($\tilde{k}_{zj}^2 < 0$)

$$\psi_{\tilde{k}_{zj}^2}(0) = 0, \quad \psi_{\tilde{k}_{zj}^2}(\infty) = 0, \quad (3.23)$$

$$\int_0^\infty d\zeta |\psi_{\tilde{k}_{zj}^2}(\zeta)|^2 = 1.$$

Плотность электронов дается выражением [2]

$$n(\zeta) = 3\pi^2 \left[\int_0^1 \frac{d\tilde{k}_z}{2\pi} (1 - \tilde{k}_z^2) |\psi_{\tilde{k}_z}(\zeta)|^2 + \frac{1}{2\pi} \sum_{\tilde{k}_{zj}^2 < \mu} |\psi_{\tilde{k}_{zj}^2}(\zeta)|^2 (\mu - \tilde{k}_{zj}^2) \right]. \quad (3.24)$$

Здесь первое слагаемое отвечает электронной плотности $n_{3D}(\zeta)$, сформированной заполненными состояниями непрерывного спектра, а второе — плотности $n_{2D}(\zeta)$ квазидвумерных электронов, заполняющих размерно-квантованные подзоны с энергией $\tilde{\epsilon}_j(\tilde{\mathbf{k}}_{\parallel}) = \tilde{k}_{zj}^2 + \tilde{\mathbf{k}}_{\parallel}^2$. За начало отсчета энергии принято значение электростатического потенциала в глубине полупроводника. Через $\mu = E_F/E_F^0 = 1 + u_{xc}(\infty)$ обозначена безразмерная энергия Ферми, которая учитывает вклад обменно-корреляционного взаимодействия электронов в химический потенциал.

Поясним появление в формуле (3.24) множителя $3\pi^2$. Имеются две формы безразмерной плотности электронов. Одна из них, \tilde{n} , порождается реше-

ниями уравнения Шредингера (3.19) в безразмерных координатах $(\zeta, \boldsymbol{\rho}_{\parallel}) = k_F(z, \mathbf{r}_{\parallel})$, связана с интегралом по спектру от $|\psi_{\tilde{k}_z}(\zeta)|^2$ и удовлетворяет требованию сохранения числа электронов в дифференциальном объеме при замене переменных в виде $N(\mathbf{r}) dz d\mathbf{r}_{\parallel} = \tilde{n}(\boldsymbol{\zeta}) d\zeta d\boldsymbol{\rho}_{\parallel}$, где $\boldsymbol{\zeta} = k_F \mathbf{r}$. Другая форма, $n(\mathbf{r}) = N(\mathbf{r})/N_+$, введена в уравнении Пуассона, так как условие локальной нейтральности в виде $n(z \rightarrow \infty) = 1$ удобно для численного контроля. С учетом сказанного легко получить соотношение $n = 3\pi^2 \tilde{n}$, которое использовано при выводе выражения (3.24).

В тех случаях, когда для сравнения с экспериментом надо было провести расчет при точно известном значении U_0 глубины потенциальной ямы для электронов, краевое условие (3.17) к уравнению Пуассона при $\zeta = 0$ заменялось на

$$u_0 = -U_0/E_F^0,$$

так как всегда $U_{xc}(0) = 0$ в силу условия $\psi(0) = 0$ для любых решений уравнения Шредингера (3.19). При обоих типах краевых условий итерационная процедура сходилась, как правило, за $i_{max} \approx 10\text{--}15$ циклов при выполнении условия выхода из цикла в виде

$$\max_{\zeta} |n_{Sch}^{(i)}(\zeta) - n_{Poi}^{(i)}(\zeta)| < 10^{-6}. \quad (3.25)$$

С ростом R_s^* требуется большее число итераций. Найденные решения уравнений Шредингера и Пуассона при обратной подстановке удовлетворяли уравнениям с точностью, лучшей чем 10^{-5} .

Конечно, следует иметь в виду, что эти оценки характеризуют точность решения дискретизованной задачи в ограниченной области координат. Методы численного интегрирования уравнения Пуассона (3.16) и Шредингера (3.19) указаны в работе [2]. Как правило, дискретизация по ζ делалась с шагом 0.01, по k — с шагом 0.002. Для интегрирования по k в области непрерывного спектра в выражении (3.24) использовалась квадратурная формула Симпсона, за исключением случаев очень больших $\zeta \gtrsim 300$, когда для интегрирования быстроосциллирующих функций (см. (3.20)) применялись формулы Филона [42]. Абсолютная точность решения зависит от метода и параметров дискретизации, а также, что оказалось наиболее существенным в случае мелких уровней, от длины расчетного интервала ζ_{max} (см. Приложение А).

²⁾ Обратим внимание на опisku в аналогичной формуле (2.36) работы [2].

3.3. Результаты и обсуждение

Самосогласованное решение системы уравнений Кона–Шэма и Пуассона было получено для случая, когда обогащенный слой на поверхности полупроводника n -типа образуется за счет положительного заряда атомов щелочного металла, адсорбированных на поверхности полупроводника. В этих условиях образуется сильный загиб зон у поверхности, в котором формируются связанные состояния, что было обнаружено методом фотоэлектронной спектроскопии на образцах p -GaAs с отрицательным сродством [43].

Глубина потенциальной ямы $-U_0$ в таких структурах равна электростатической энергии электрона на границе металл–полупроводник (см. рис. 1) и зависит от химических свойств металла и толщины осаждаемого слоя. Граничное условие (3.17) или (3.23) для уравнения Пуассона на поверхности при $\zeta = 0$ и величина безразмерного радиуса Вигнера–Зейтца R_s^* являются двумя параметрами, которые полностью определяют решение и позволяют найти зависимости числа и положения уровней размерного квантования от приложенного поля (или глубины потенциальной ямы) и от R_s^* , т. е. от концентрации свободных носителей в объеме. Условия (3.20) и (3.23) отбора собственных решений уравнения Шредингера (3.19) от указанных параметров не зависят.

Для удобства последующего сравнения с экспериментом эффективная масса электронов m_c^* и диэлектрическая постоянная κ полупроводника были при расчетах взяты близкими к параметрам n -InAs, которые использовались в работах [8, 9]. Тем не менее следует остановиться на возможном влиянии неточностей в значениях объемных параметров n -InAs на результаты расчета. Помимо необходимости учитывать довольно сильную зависимость от температуры ширины запрещенной зоны и связанных с ней величин, таких как эффективная масса и диэлектрическая проницаемость κ , надо отметить, что значения κ для рассматриваемого полупроводника определены весьма скудно. В справочнике [44] приведено значение низкочастотной диэлектрической постоянной только для 300 К, что должно сильно отличаться от значений при температуре эксперимента 30 К. В то же время диэлектрическая проницаемость на низких частотах входит в эффективные атомные единицы длины, энергии и радиус Вигнера–Зейтца (см. формулы (3.4)). Имеющийся в литературе разброс значений κ порядка 20% также может влиять на степень согласия расчета и экспериментальных данных.

Наконец, заметим, что все приведенные здесь расчетные кривые и значения энергий находились с учетом обменно-корреляционного потенциала в форме, принятой в работе [2]. Отличие их от расчета в приближении Хартри (без учета u_{xc}) лежит в пределах 2–5%, если отсчитывать энергии от соответственно вычисленного уровня Ферми. С учетом сказанного выше о точности экспериментальных данных и точности задания параметров полупроводника можно сделать вывод, что для структур со значением $R_s^* \leq 0.35$ учет обменно-корреляционного взаимодействия при сравнении теории с экспериментом лежит за пределами точности в большинстве случаев.

3.3.1. Энергетический спектр и распределение плотности электронов

На рис. 2 показаны распределение в пространстве плотности свободных электронов, занимающих состояния непрерывного спектра, и плотности квазидвумерных электронов, занимающих состояния размерно-квантованных подзон и локализованных в потенциальной яме. На этом рисунке хорошо видно, что вблизи поверхности приложение к структуре притягивающего электрического поля увеличивает плотность квазидвумерных электронов и уменьшает вклад объемных состояний в полную плотность поверхностного заряда. Тем не менее предложенный подход позволил получить итеративное решение задачи об энергетическом спектре квазидвумерных электронов в обогащенном слое, несмотря на использование трехмерного квазиклассического выражения (3.11) для индуцированной плотности электронов во всем пространстве, включая область вблизи поверхности.

На рис. 3 показаны зависимости энергии связи $\varepsilon_j = -\tilde{k}_{zj}^2$ локализованных состояний от глубины потенциальной ямы. Следует отметить, что найти самосогласованное решение уравнений в окрестности значений потенциала на поверхности, при которых в системе появляется новый энергетический уровень, не удавалось, так как итерации не сходились. Это связано с тем, что появление нового связанного состояния начинает заметно влиять на распределение электронов в пространстве, когда его энергия еще очень мала (меньше чем $5 \cdot 10^{-4} E_F^0$) и, соответственно, протяженность волновой функции велика по сравнению с ζ_{max} . Подробнее эта проблема обсуждается в Приложении А. Численные результаты настоящего раздела получены для области $0 \leq k_F z \leq 150$.

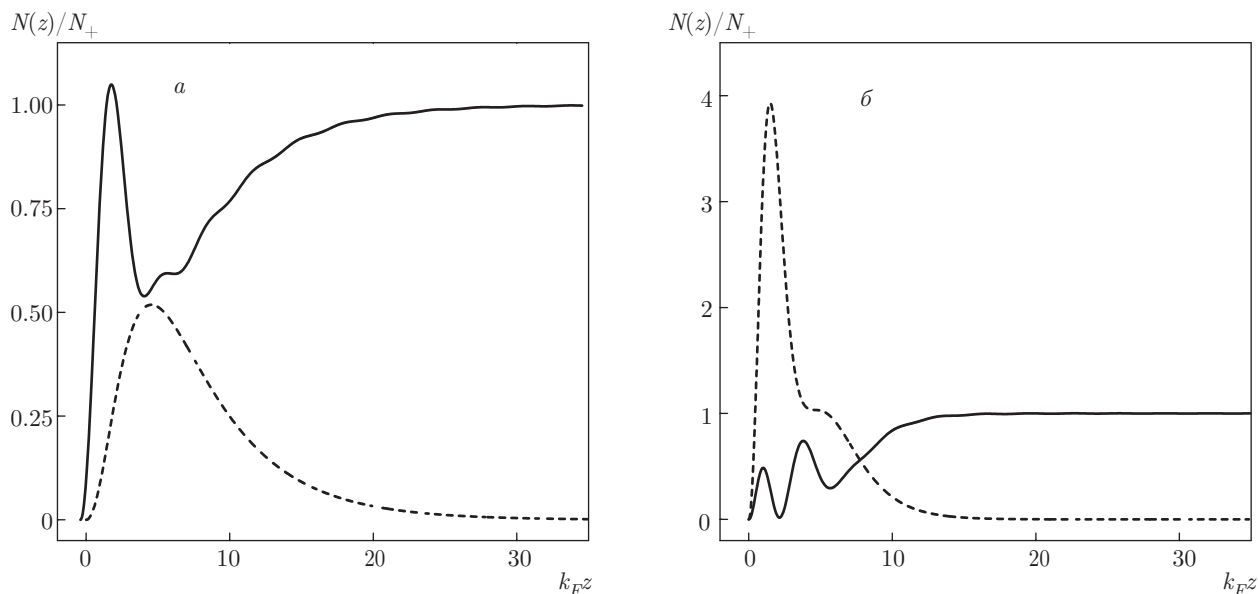


Рис. 2. Зависимости составляющих полной электронной плотности от расстояния до поверхности полупроводника. Сплошные кривые — плотность n_{3D} свободных электронов (заполненные состояния непрерывного спектра), штриховые кривые — плотность n_{2D} квазидвумерных электронов. *а)* Случай нулевого электрического поля $\mathcal{E} = 0$ на поверхности, когда в самоиндуцированной потенциальной яме имеется одна размерно-квантованная подзона; *б)* те же зависимости при конечном \mathcal{E} , когда безразмерная глубина ямы $u(0) = -4.6$ и в энергетическом спектре электронов имеются две двумерные подзоны. $R_s^* = 0.32$

Таблица 1. Энергии связи для минимумов подзон размерного квантования, рассчитанные в случае параболической зоны проводимости с учетом обменно-корреляционного взаимодействия электронов. Значения глубины ямы U_0 и энергий отсчитываются от уровня Ферми $E_F = 63.7$ мэВ и $E_F = 84.2$ мэВ для образцов из работ соответственно [8] и [9]

Образец	Ссылка, T, К	U_0 , мэВ	E_0^{th} , мэВ	E_0^{exp} , мэВ	E_1^{th} , мэВ	E_1^{exp} , мэВ	E_2^{th} , мэВ	E_2^{exp} , мэВ
Cs/InAs	[8], 30 К	400	187	184	96	100	—	—
InAs clean	[9], 80 К	230(*)	115	115	—	85	—	82(??)
Ag/InAs	[9], 80 К	385	179	185	105	100±5	—	83(??)
Ag/InAs	[9], 80 К	494	226	228	121	125	93	85
Ag/InAs	[9], 80 К	524	239	240	126	128	94	85

Примечания. Во второй колонке указана температура образца, при которой проводились измерения. Знаком (*) отмечен исходный загиб зон чистой поверхности, найденный нами по измеренной энергии дна основной подзоны, которая была оценена из графика на Fig. 6 в работе [9] (см. текст). Знаком (??) отмечены приведенные в [9] плохо определяемые положения минимумов третьей подзоны, которые меньше вычисленной энергии Ферми и формально попадают в непрерывный спектр, что означает невозможность существования третьей подзоны в параболическом случае.

В табл. 1 представлены рассчитанные нами энергии связи для минимумов размерных подзон (верхний индекс «th») и значения, которые были получены авторами работ [8, 9] подбором параметров энергетического спектра квазидвумерных электро-

нов для воспроизведения измеренной зависимости фотоэлектронного тока от напряжения задержки (верхний индекс «exp»). При этой подгонке кривых плотность состояний в размерно-квантованных подзонах считалась не зависящей от энергии, т. е. пре-

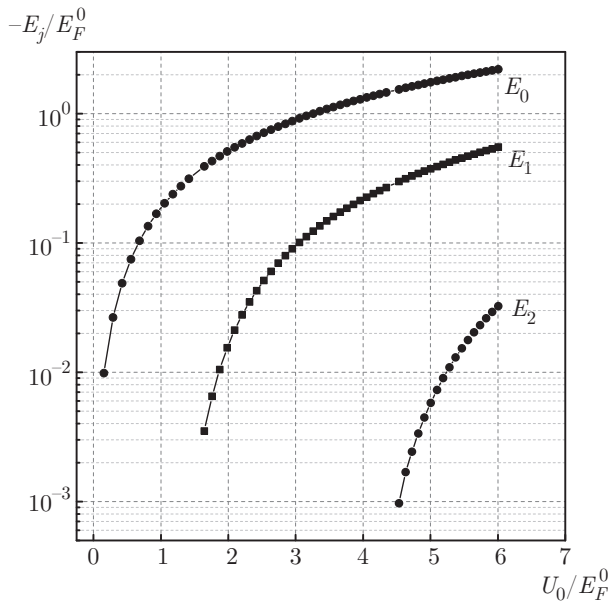


Рис. 3. Зависимости энергии связи для минимумов трех подзон размерного квантования от глубины потенциальной ямы: $j = 0$ — основная подзона; $j = 1, 2$ — возбужденные подзоны; $R_s^* = 0.32$

небрегалось непараболичностью закона дисперсии в подзонах размерного квантования.

В разд. 4 показано, что на самом деле двумерная плотность состояний существенно зависит от энергии. Тем не менее из табл. 1 видно, что рассчитанные нами без свободных параметров положения минимумов двумерных подзон относительно уровня Ферми оказались в неплохом согласии с экспериментальными данными, точность которых оценивалась от 25 до ± 5 мэВ. При $k_{||} \neq 0$ рассчитанный в параболическом приближении энергетический спектр двумерных подзон будет уже значительно отличаться от измеренного, как следует из приведенных ниже рис. 7б и 8.

В наших вычислениях использованы параметры полупроводника, принятые в указанных статьях. В работе [8] исследовались структуры Cs/*n*-InAs с объемной концентрацией электронов $N = 3.0 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ ($R_s^* = 0.321$). В работе [9] исследовались структуры Ag/*n*-InAs с $N = 4.5 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ ($R_s^* = 0.288$). В качестве объемных параметров *n*-InAs взяты $m_c^* = 0.023$ для эффективной массы электронов в минимуме зоны проводимости и $\kappa = 12.55$ для диэлектрической проницаемости решетки. Из-за зависимости параметров полупроводника (E_g , m_c^* , κ) от температуры T для сравнения с нашим расчетом ($T = 0$) использовались только данные, измеренные при наиболее

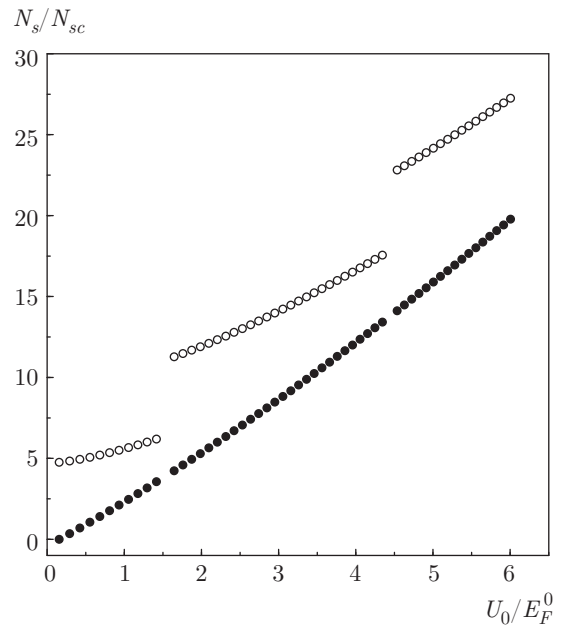


Рис. 4. Безразмерная поверхностная плотность избыточных электронов $n_s = N_s/N_{sc}$ в полупроводнике как функция глубины потенциальной ямы. Темные кружки показывают полную поверхностную плотность избыточных электронов, светлые — поверхностную плотность $n_s^{(2D)}$ электронов на локализованных состояниях. Характеристическая поверхностная плотность $N_{sc} = N_+/k_F = k_F^2/3\pi^2$, $R_s^* = 0.32$

низких температурах. Следует отметить, что в работе [9] даже на чистой поверхности InAs имелся загиб зон. Необходимая для расчета поверхностного потенциала величина начального загиба находилась решением обратной задачи, когда загиб зон на чистой поверхности вычисляется по экспериментально определенной энергии размерного уровня (см. табл. 1).

3.3.2. Поверхностная плотность электронов

На рис. 4 показана зависимость безразмерной избыточной плотности n_s электронов на единицу площади поверхности от глубины потенциальной ямы U_0 . Здесь

$$n_s = \int_0^\infty d\zeta [n(\zeta) - 1] = \frac{N_s}{N_{sc}}, \quad (3.26)$$

где N_s определяется формулой (3.15) и характерная поверхностная плотность $N_{sc} = N_+/k_F = k_F^2/3\pi^2$. При $N_+ = 3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ имеем $N_{sc} = 1.45 \cdot 10^{11} \text{ см}^{-2}$.

В то время как n_s на рис. 4 непрерывно зависит от U_0 , поверхностная плотность $n_s^{(2D)}$ квазидвумерных электронов является разрывной функцией

глубины потенциальной ямы. Она имеет скачки постоянной величины при тех значениях U_0 , когда у уравнения (3.19) при $k_{\parallel} = 0$ появляется новое дискретное собственное значение $k_{zj}^2 \leq 0$. При этом в системе появляется еще одна подзона $E_j(k_{\parallel})$, которая сразу заполняется до уровня Ферми конечным числом электронов. Одновременно в приповерхностной области плотность трехмерных электронов падает ниже объемной (см. рис. 2). Согласно формуле (3.26), это делает полную поверхностную плотность n_s меньше поверхностной плотности двумерных носителей, что видно на рис. 4 и отмечалось в экспериментальных работах (например, Fig. 12 в [45], рис. 4 и последний абзац разд. 3 в [46]). Полученный результат указывает на необходимость полного квантового рассмотрения как квазидвумерных, так и объемных состояний, поскольку они влияют друг на друга.

Уменьшение вблизи поверхности плотности электронов в состояниях непрерывного спектра при формировании квазидвумерного электронного газа следует учитывать при интерпретации измеренной зависимости фотоэлектронной эмиссии от энергии возбуждающих фотонов и глубины выхода фотоэлектронов, которая обсуждается, например, в работе [47] или в работе [8] в связи с Fig. 3 и в работе [9] в связи с Fig. 4, 5.

Сравнение представленного на рис. 4 результата точного расчета с аналогичными кривыми на Fig. 10 работы [13] показывает, что, используя модельный потенциал Бараффа – Аппельбаума, можно полуколичественно оценить связь глубины ямы с плотностью поверхностного заряда. Однако, что касается энергии локализованных в такой яме состояний, ошибка может быть значительнее (см. рис. 3а и 3б в работе [2], где показано аналогичное сравнение для случая поверхности нейтрального металла).

3.3.3. Емкость и C – V -характеристика обогащенного слоя

Полная дифференциальная емкость структуры описывается формулой $C = C_{3D} + C_{2D}$ соответственно вкладу от электронов в заполненных состояниях непрерывной и дискретной частей спектра (см. формулу (3.14) и текст после нее).

Зависимость полной электростатической емкости C на единицу площади от глубины U_0 потенциальной ямы представлена на рис. 5. Кривая получена численным дифференцированием соответствующего заряда согласно формуле (3.14), но в безразмерном виде (см. рис. 4), т. е. $C/C_c = dn_s/du_0$, где характерная емкость на единицу площади есть

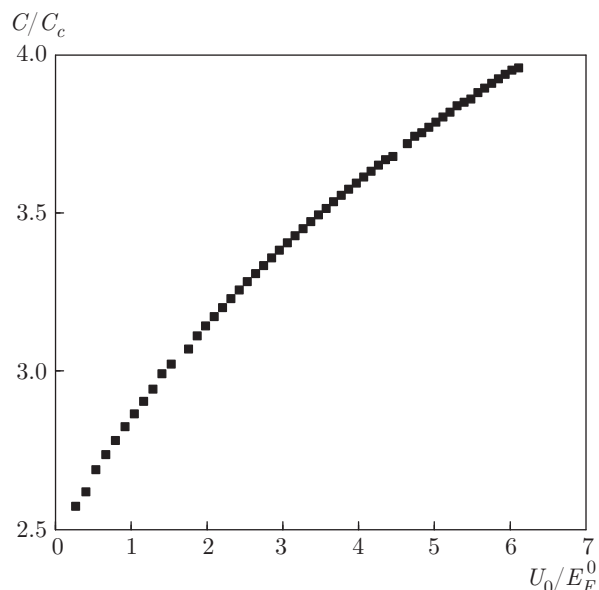


Рис. 5. Зависимость безразмерной электростатической емкости на единицу площади от глубины U_0 потенциальной ямы. Характерная емкость C_c на единицу площади определена в тексте формулой (3.27). $R_s^* = 0.32$

$$C_c = \frac{2\chi}{3\pi^2} [\text{a.e.}^*] = \frac{2\chi}{3\pi^2 a_B^* [\text{см}]} = \frac{2m_c^*}{3\pi^2 a_B [\text{см}]} = 0.142m_c^* \left[\frac{\text{МКФ}}{\text{мм}^2} \right]. \quad (3.27)$$

Как и кривая полной поверхностной плотности $n_s(u_0)$ на рис. 4, рассчитанная зависимость полной емкости C от глубины потенциальной ямы на рис. 5 не показывает никаких особенностей при появлении в яме нового уровня, хотя емкость есть производная заряда по потенциалу. Такое поведение экспериментальной C – V -кривой в отсутствие нормального к поверхности магнитного поля отмечалось Цуи [7].

Непрерывная зависимость от глубины потенциальной ямы плотности поверхностного заряда на рис. 4 и ее производной на рис. 5 при одновременном скачкообразном увеличении плотности двумерных электронов $n_s^{(2D)}$ в момент формирования новой двумерной подзоны означает, что вклад в поверхностный заряд электронов в состояниях непрерывного спектра также скачкообразно уменьшается на такую же величину.

Качественно причину синхронности этих изменений можно усмотреть, сопоставляя пространственные распределения плотности n_{2D} квазидвумерных и плотности n_{3D} трехмерных электронов, показанные на рис. 2. Видно, что каждому максимуму плотности n_{2D} отвечает провал в плотности n_{3D} . Понять такое поведение можно на основе осцилляционной

теоремы Штурма (см., например, [48, 49]), согласно которой появление связанного состояния в потенциальной яме уравнения (3.19) вызывает появление дополнительных нулей в области ямы у всех волновых функций непрерывного спектра со сколь угодно малой энергией $\tilde{k}_z^2 > 0$. С ростом энергии положение этих нулей смещается к поверхности, так как нуль каждого состояния с большей энергией должен лежать между нулями состояния с меньшей энергией, и все решения удовлетворяют граничному условию $\psi_{\tilde{k}_z}(0) = 0$. В силу непрерывности волновых функций плотность трехмерных электронов в окрестности каждого нуля оказывается подавленной, что качественно объясняет уменьшение в этой области координат значения интеграла по непрерывному спектру в (3.24).

Непрерывные кривые на рис. 4 и 5 отражают непрерывность зависимости от приложенного электрического поля $\tilde{\mathcal{E}}$ значений $u(0)$ самосогласованного потенциала и его производной $du(0)/d\tilde{\mathcal{E}}$ на поверхности. Отсюда следует, что непрерывно зависит от нормальной компоненты электрического поля не только полный заряд полупроводника, как полагается по теореме Гаусса, но и дипольный момент пространственного распределения этого заряда, который равен разности потенциалов $V(\infty) - V(0)$. Таким образом, наши вычисления распространяют результаты работы Кона и Маджумдара [50] на газ заряженных фермионов с самосогласованным полем и снимают тем самым сомнения, высказанные в заключительном замечании этой работы.

Рисунок 6 иллюстрирует поведение полной емкости на единицу площади от параметра R_s^* при двух заданных значениях нормальной к поверхности компоненты электрического поля F . При этом безразмерное электрическое поле (3.17), которое задает граничное условие при решении безразмерного уравнения Пуассона (3.16), изменяется, так как оно зависит от R_s^* (см. определение характерного поля после формул (3.17)).

Отметим, что в случае кривой 1 в неглубокой самоиндуцированной потенциальной яме (кривая 1') имеется только одна размерно-квантованная подзона с малой энергией связи, тогда как в случае кривой 2 с ростом R_s^* в квантовой яме (кривая 2') число подзон доходит до трех. Тем не менее обе кривые гладкие, скачков при появлении новых подзон на этой зависимости также нет.

Хотя значения емкости с полем и без поля оказались одного порядка, все же зависимости C от объемной концентрации электронов в отсутствие поля и при фиксированном приложенном поле заметно раз-

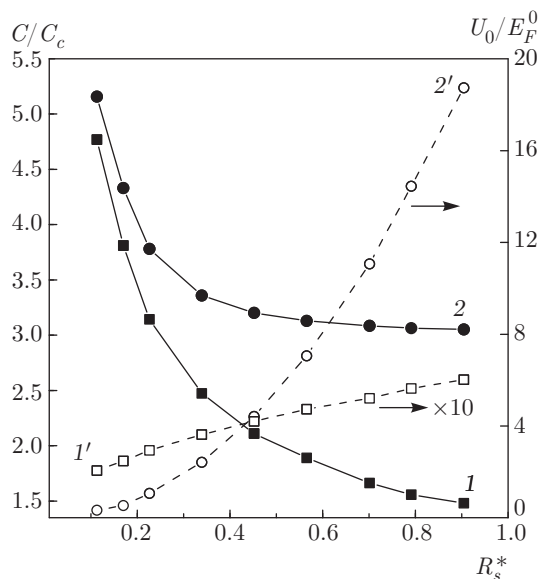


Рис. 6. Зависимости емкости C на единицу площади и глубины потенциальной ямы U_0 от концентрации свободных носителей для структуры с обогащенным слоем при двух значениях внутреннего электрического поля F на поверхности. Для кривых 1 и 1' поле $F = 0$, для 2 и 2' поле $F = 1.35 \cdot 10^5$ В/см. В случае $F = 0$ в приведенном диапазоне R_s^* имеется только одна размерно-квантованная подзона. В случае $F = 1.35 \cdot 10^5$ В/см с ростом R_s^* число размерно-квантованных подзон доходит до трех, увеличиваясь на единицу при $R_s^* = 0.22$ и $R_s^* = 0.7$

личаются. В последнем случае при больших R_s^* явно обозначается выход кривой $C(R_s^*)$ на насыщение.

Сопоставим рассчитанную зависимость емкости от глубины потенциальной ямы, представленную на рис. 5, с измеренной Цуи в работе [7] (см. в ней рис. 13). При $m_c^* = 0.023$ по формуле (5) для характеристической емкости получим $C_c = 1.74 \cdot 10^{-3}$ мкФ/мм². Отсюда, согласно кривой на рис. 5, получаем изменение емкости от $2.3 \cdot 10^{-9}$ Ф до $3.7 \cdot 10^{-9}$ Ф для указанной Цуи площади переходов $5.34 \cdot 10^{-3}$ см⁻². Измеренная зависимость емкости образца от напряжения на затворе меняется в пределах от $3 \cdot 10^{-9}$ Ф до $4.7 \cdot 10^{-9}$ Ф. Таким образом, по порядку величины рассчитанные емкость обогащенного слоя и масштаб изменения $C-V$ -характеристики совпадают с данными измерений. Наличие в образцах Цуи в окисле свинца встроенного поля от контактной разности потенциалов 0.4 В и различие объемного легирования образцов ($3 \cdot 10^{17}$ см⁻³ в расчете и $1.2 \cdot 10^{16}$ см⁻³ в работе [7]) не меняют этого вывода согласно показанным на рис. 6 зависимостям емкости от приложенного к поверхности поля F и объемного легирования R_s^* .

4. НЕПАРАБОЛИЧЕСКИЙ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР ЭЛЕКТРОНОВ ПРОВОДИМОСТИ

В предыдущем разделе были представлены результаты расчета свойств квазидвумерного электронного газа в предположении параболического закона дисперсии электронов в зоне проводимости с параметрами m_e^* , κ , N_+ , типичными для образцов n -InAs. Однако InAs обладает сравнительно узкой запрещенной зоной, что делает важным учет непараболическости закона дисперсии при количественном сравнении расчета с экспериментальными результатами. В настоящем разделе электронный спектр полупроводника n -типа с обогащенным слоем на поверхности рассчитывается для случая непараболического закона дисперсии электронов в объеме. Так как при этом эффективная масса зависит от энергии, будем использовать обычные атомные единицы $e = m_e = \hbar = 1$ вместо эффективных единиц предыдущего раздела.

4.1. Основные уравнения для случая конечной ширины запрещенной зоны

Конечная ширина запрещенной зоны приводит к непараболической зоне проводимости. В рамках разрабатываемого алгоритма это влечет за собой изменения в уравнениях эффективной массы и Пуассона, образующих в случае неограниченного электронного газа систему вариационных уравнений функционала энергии в приближении Кона – Шэма. Рассмотрим эти изменения по отдельности.

4.1.1. Уравнение эффективной массы

Энергетический спектр электронов в зоне проводимости полупроводника с конечной шириной запрещенной зоны в двухзонном приближении находится из решения дисперсионного уравнения, которое имеет вид

$$E \left(1 + \frac{E}{E_g} \right) - \frac{k^2}{2m_c^*} = 0. \quad (4.1)$$

За начало отсчета энергии выбрано дно зоны проводимости, параметр m_c^* — эффективная масса при $E = 0$. Состояниям в зоне проводимости отвечает корень $E_1(k)$ — больший из двух корней этого уравнения,

$$E_{1,2}(k) = \frac{E_g}{2} \left(\pm \sqrt{1 + \frac{2k^2}{E_g m_c^*}} - 1 \right). \quad (4.2)$$

Однозонное уравнение эффективной массы в двухзонном приближении для непараболической зоны проводимости можно получить, следуя работе Келдыша [40], обычным образом используя корень $E_1(k)$ (4.2) как эффективный гамильтониан и делая замену $\mathbf{k} \rightarrow -i\nabla$, $E \rightarrow E - U_{eff}(\mathbf{r})$. Тогда для собственных состояний зоны проводимости в потенциале $U_{eff}(\mathbf{r})$ получаем уравнение

$$[E_1(-i\nabla) + U_{eff}(\mathbf{r})] \psi_E(\mathbf{r}) = E \psi_E(\mathbf{r}), \quad (4.3)$$

где E — энергия собственного состояния. Чтобы избавиться от необходимости работать с квадратным корнем из оператора, воспользуемся приемом из работы Келдыша [40]. Перепишем уравнение (4.3) в виде

$$[E_1(-i\nabla) - (E - U_{eff}(\mathbf{r}))] \psi_E(\mathbf{r}) = 0 \quad (4.4)$$

и подействуем на него оператором

$$E_2(-i\nabla) - [E - U_{eff}(\mathbf{r})]. \quad (4.5)$$

При этом будем предполагать, что рассматривается только такая область значений энергии E , в которой оператор (4.5) не имеет собственных функций.

Для упрощения формул в дальнейшем введем штрихованные переменные

$$E' = E - U_{xc}(\infty), \quad U'(\mathbf{r}) = U_{eff}(\mathbf{r}) - U_{xc}(\infty),$$

где $U_{xc}(\infty) = U_{xc}(N_+)$ в силу нейтральности системы на бесконечности. В этих переменных, независимо от учета или пренебрежения U_{xc} , обеспечивается универсальное определение границы непрерывного и дискретного спектров задачи.

Выразив полином второго порядка (4.1) относительно переменной E через его корни согласно формуле $P_2(E) = (E - E_1)(E - E_2)$, приходим к уравнению

$$-\frac{1}{2m_c^*} \nabla^2 \psi_{E'}(\mathbf{r}) = [E' - U'(\mathbf{r})] \times \left[1 + \frac{E' - U'(\mathbf{r})}{E_g} \right] \psi_{E'}(\mathbf{r}). \quad (4.6)$$

Нетрудно увидеть, что уравнение (4.6) можно получить, если сразу в дисперсионном соотношении (4.1) заменить $E \rightarrow E' - U'$ и $\mathbf{k} \rightarrow -i\nabla$. Однако при переходе от (4.3) к (4.6) нужно было пренебречь коммутатором операторов $[\hat{U}', \hat{E}_1]$. Эта величина равна нулю, если $U' = \text{const}$. Следовательно, в координатном представлении отличие коммутатора от нуля будет пропорционально производным потенциала, из которых должен сформироваться малый параметр метода эффективной массы.

Последовательный вывод уравнения эффективной массы, которое описывает динамику электрона в плавном потенциальном поле $U'(\mathbf{r})$ с учетом непараболичности зоны проводимости, проведен в работе [22]. Он основан на разложении решения возмущенного уравнения Шредингера по функциям Блоха зоны проводимости с использованием математического аппарата обобщенного гильбертова пространства. Здесь приведем лишь основные моменты этого вывода, которые необходимы для понимания.

Цель — обосновать однозонное уравнение эффективной массы (4.6) в случае непараболической зоны проводимости и выделить в явном виде малый параметр теории — достигается применением регулярной теории возмущений к уравнению

$$[H_0 + U'(\mathbf{r})] \Psi_{E'}(\mathbf{r}) = E' \Psi_{E'}(\mathbf{r}). \quad (4.7)$$

Здесь $\Psi_{E'}(\mathbf{r})$ — точные собственные функции одночастичного гамильтониана кристалла, возмущенного потенциалом $U'(\mathbf{r})$. Кроме того, необходимо знать, особенно в задачах с самосогласованным полем, как связаны точное решение $\Psi_{E'}(\mathbf{r})$ и собственные функции задачи (4.6). Приведенный выше вывод уравнения (4.6) ответа на эти вопросы не дает.

В рамках двухзонного приближения следует искать решения уравнения (4.7), где H_0 — гамильтониан невозмущенного кристалла, в виде разложения

$$\Psi_E(\mathbf{r}) = \sum_{n=1}^{n=2} \int_{\Omega_*} d\mathbf{k} \phi_{nE}(\mathbf{k}) \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (4.8)$$

по функциям Блоха $\psi_{1,2}$ зоны проводимости и валентной зоны,

$$\psi_{(1,2)\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = (2\pi)^{-3/2} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{(1,2)\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (4.9)$$

Здесь через Ω_* обозначена первая зона Бриллюэна, индексы «1» и «2» используются для обозначения величин, относящихся соответственно к зоне проводимости и к валентной зоне. Для этой цели могут также использоваться буквенные индексы «с» и «v».

Система уравнений для коэффициентов разложения $\phi_{(1,2)E'}(\mathbf{k})$ может быть представлена в матричном по зонным индексам виде:

$$\int_{\Omega_*} d\mathbf{k}' \begin{pmatrix} \hat{E}_1 + \hat{U}'_{11} & \hat{U}'_{12} \\ \hat{U}'_{21} & \hat{E}_2 + \hat{U}'_{22} \end{pmatrix}_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \times \\ \times \begin{pmatrix} \phi_{1E'}(\mathbf{k}') \\ \phi_{2E'}(\mathbf{k}') \end{pmatrix} = E' \begin{pmatrix} \phi_{1E'}(\mathbf{k}) \\ \phi_{2E'}(\mathbf{k}) \end{pmatrix}. \quad (4.10)$$

Операторные элементы матрицы системы (4.10) с учетом $\mathbf{k}, \mathbf{k}' \in \Omega_*$ имеют вид

$$\left(\hat{E}_{1,2} \right)_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = E_{1,2}(\mathbf{k}) \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'), \quad (4.11a)$$

$$\left(\hat{U}'_{nn'} \right)_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') (u_{n\mathbf{k}} | u_{n'\mathbf{k}'}), \quad (4.11b)$$

$$n, n' = 1, 2.$$

Здесь через $(u_{n\mathbf{k}} | u_{n'\mathbf{k}'})$ обозначено скалярное произведение по элементарной ячейке кристалла блоховских амплитуд, ортонормированных при одинаковых \mathbf{k} . Через $\tilde{U}(\mathbf{q})$ обозначены коэффициенты разложения потенциала возмущения в интеграл Фурье,

$$\tilde{U}(\mathbf{q}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} U'(\mathbf{r}).$$

Благодаря плавности $U'(\mathbf{r})$, функция $\tilde{U}(\mathbf{q})$ имеет острый максимум в области малых \mathbf{q} . Используя решения Кэйна ([32], формулы (17)), которые в случае, когда вектор \mathbf{k} параллелен оси z , выражают $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ через $u_{n0}(\mathbf{r})$ в окрестности дна зоны проводимости при $\mathbf{k} = 0$, можно показать, что

$$(u_{n\mathbf{k}} | u_{n'\mathbf{k}'}) \approx 1 + \mathcal{O} \left(\frac{(\mathbf{k} - \mathbf{k}')^2}{m_c E_g} \right), \quad (4.12a)$$

$$(u_{n\mathbf{k}} | u_{n'\mathbf{k}'}) \approx \mathcal{O} \left(\frac{|\mathbf{k} - \mathbf{k}'|}{\sqrt{m_c E_g}} \right), \quad n \neq n'. \quad (4.12b)$$

Опустив в уравнениях (4.10) члены, вклад которых в решение пропорционален малому параметру $k^2/m_c E_g$, получим систему из двух несвязанных уравнений для $\phi_{1,2}(\mathbf{k})$:

$$\left[E' \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - \tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - E_1(\mathbf{k}) \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \right] \times \\ \times \phi_{1E'}(\mathbf{k}') = 0, \quad (4.13a)$$

$$\left[E' \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - \tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}') - E_2(\mathbf{k}) \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \right] \times \\ \times \phi_{2E'}(\mathbf{k}') = 0. \quad (4.13b)$$

Здесь и далее по повторяющимся штрихованным переменным подразумевается интегрирование по области Ω_* .

Воспользуемся теперь приемом Келдыша в представлении с базисом из выбранных функций Блоха (4.9). Для этого подействуем на уравнение (4.13a) оператором, который определяет левую часть уравнения (4.13b), при условии, что E' не является собственным значением задачи (4.13b). После несложных преобразований получим

$$\left\{ \left(E' \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'') - \tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}'') \right) \left[1 + \frac{\hat{E}' - \hat{U}'}{E_g} \right]_{\mathbf{k}''\mathbf{k}'} + \right. \\ \left. + \frac{[\hat{U}, \hat{E}_1]_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}}{E_g} \right\} \phi_{1E'}(\mathbf{k}') = \frac{k^2}{2m_c} \phi_{1E'}(\mathbf{k}). \quad (4.14)$$

Через $[\dots]_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}$ обозначены приближенные матричные элементы соответствующих операторов, вычисленные в базе из функций Блоха зоны проводимости согласно (4.12а). В случае коммутатора, например, в явном виде имеем

$$[\hat{U}', \hat{E}_1]_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \tilde{U}(\mathbf{k} - \mathbf{k}'')E_1(k'')\delta(\mathbf{k}'' - \mathbf{k}') - E_1(\mathbf{k})\delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}'')\tilde{U}'(\mathbf{k}'' - \mathbf{k}'). \quad (4.15)$$

Уравнение (4.14) представляет собой однозонное уравнение эффективной массы для зоны проводимости с точностью до межзонных матричных элементов потенциала U' . В работе [22] показано, что множество функций, которые могут быть представлены своим разложением по базису из функций Блоха для зоны проводимости, образует ортогональное подпространство \mathcal{H}_c в обобщенном гильбертовом пространстве \mathcal{H} . Чтобы перейти к координатной форме уравнения эффективной массы, рассмотрим функции $\phi_{cE'}(\mathbf{k})$, определенные выражением (4.8), как проекции некоторого вектора из обобщенного гильбертова пространства на собственные функции оператора импульса $(2\pi)^{-3/2}\exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x})$ в координатном представлении, т. е. введем функции

$$\Phi_{E'}(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_{\Omega_*} d\mathbf{k} \phi_{cE'}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}}, \quad (4.16)$$

где ограничение области интегрирования первой зоной Бриллюэна диктуется областью определения функций $\phi_{cE'}$.

Заметим, что множество собственных функций оператора импульса для области значений $\mathbf{k} \in \Omega_*$ также образует базис в некотором ортогональном подпространстве обобщенного гильбертова пространства, которое обозначим через \mathcal{H}_* . Отображение уравнения (4.14) на это подпространство в координатном представлении принимает вид

$$(E' - U'(\mathbf{x})) \left(1 + \frac{E' - U'(\mathbf{x})}{E_g} \right) \Phi_{E'}(\mathbf{x}) + \frac{1}{E_g} [\hat{U}', \hat{E}_1]_{\mathbf{x}\mathbf{x}'} \Phi_{E'}(\mathbf{x}') = -\frac{1}{2m_c} \nabla_{\mathbf{x}}^2 \Phi_{E'}(\mathbf{x}). \quad (4.17)$$

Без члена с коммутатором это уравнение аналогично (4.6), только теперь определено функциональное пространство, к которому принадлежат решения. Под $U'(\mathbf{x})$ в (4.17) можно понимать и обычный кулоновский потенциал самосогласованного поля, если пренебрегать обменно-корреляционным взаимодействием электронов.

Можно показать, что для вклада от коммутатора в уравнение эффективной массы получается формула ([22] разд. 2.1)

$$\frac{1}{E_g} [\hat{U}', \hat{E}_1]_{\mathbf{x}\mathbf{x}'} \Phi(\mathbf{x}') = \frac{1}{m_c^* E_g} \left[\frac{1}{2} \frac{\partial^2 U'}{\partial \mathbf{x}^2} + \frac{\partial U'}{\partial \mathbf{x}} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \right] \Phi(\mathbf{x}), \quad (4.18)$$

которая точна до членов порядка $\bar{k}^2/m_c^* E_g < 1$ включительно.

В этой оценке под \bar{k} понимается масштаб области волновых векторов, которые дают основной вклад в искомое решение. Для связанных состояний он определяется обратной величиной характерного масштаба потенциала L_U , для состояний непрерывного спектра — величиной k_F . Из выражения (4.18) видно, что сравниваться эти масштабы должны, как и предполагалось в работе [40], с характерной длиной $L_g \simeq 1/\sqrt{m_c^* E_g}$, которая для полупроводника с узкой запрещенной зоной порядка 0.5 эВ превышает типичное значение постоянной решетки примерно в 4–5 раз. Так, при $m_c^* \simeq 0.025$ и указанной ширине запрещенной зоны имеем $L_g \simeq 2.5$ нм.

Очевидно, что условие $L_g^2 d^2 U / d\mathbf{r}^2 < 1$ применимости уравнения (4.6) в качестве уравнения метода эффективной массы несколько жестче, чем в однозонном случае, когда предполагается плавность возмущающего потенциала и решений уравнения Шредингера на масштабах порядка постоянной решетки $a \simeq 0.5$ нм. Тем не менее оценка параметра малости теории при $k_F L_U \simeq 5-10$ (см. рис. 1, 2) и $E_g/E_F^0 \simeq 6$ дает вполне удовлетворительный результат $L_g^2/L_U^2 \simeq 1/75-1/300$. Поэтому далее под уравнением метода эффективной массы в нулевом приближении по производным потенциала U' будем понимать уравнение (4.17), в котором опущено слагаемое с коммутатором.

4.1.2. Связь собственных функций уравнения эффективной массы с точными собственными функциями возмущенного кристалла

Для того чтобы получить условия отбора собственных функций уравнения (4.6) из всех возможных решений и формулы для матричных элементов операторов наблюдаемых в этом представлении, необходимо установить связь решения $\Phi_{E'}(\mathbf{x})$ с точной волновой функцией $\Psi_{E'}(\mathbf{r})$ электронов в зоне проводимости в присутствии внешнего потенциала.

Используя формулы (4.8), (4.9) и (4.16), получим

$$\Psi_{E'}(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{x}' w_c(\mathbf{r}; \mathbf{x}') \Phi_{E'}(\mathbf{x}'), \quad (4.19)$$

где через

$$w_c(\mathbf{r}; \mathbf{x}) = \int_{\Omega_*} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^{3/2}} \psi_{c\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \quad (4.20)$$

обозначена обобщенная функция Ваннье для зоны проводимости.

Заметим, что функция $w_c(\mathbf{r}; \mathbf{x})$ является матричным элементом оператора \hat{W} , который отображает подпространство \mathcal{H}_* в \mathcal{H}_c . Его абстрактное представление через векторы обобщенного гильбертова пространства в обозначениях Дирака имеет вид [22]

$$\hat{W}_c = \int_{\Omega_*} d\mathbf{k} |\mathbf{k}, c\rangle \langle \mathbf{k}|, \quad (4.21)$$

где через $|\mathbf{k}, c\rangle$ обозначен дельта-нормированный собственный вектор гамильтониана H_0 из \mathcal{H} , отвечающий функции Блоха с квазиимпульсом \mathbf{k} для зоны проводимости, и через $|\mathbf{k}\rangle$ — собственный вектор оператора импульса. Матричные элементы оператора \hat{W}_c в координатном представлении,

$$\langle \mathbf{r} | \hat{W}_c | \mathbf{x} \rangle = \int_{\Omega_*} d\mathbf{k} \langle \mathbf{r} | \mathbf{k}, c \rangle \langle \mathbf{k} | \mathbf{x} \rangle, \quad (4.22)$$

совпадают с формулой (4.20), которая определяет обобщенную функцию Ваннье.

В работе [22] показано, что оператор \hat{W}_c унитарный. В данном случае, когда одно подпространство обобщенного гильбертова пространства отображается на другое, это означает наличие следующих свойств:

$$\hat{W}_c^\dagger \hat{W}_c = \hat{\mathbf{1}}_*, \quad \hat{W}_c \hat{W}_c^\dagger = \hat{\mathbf{1}}_c, \quad (4.23)$$

где введены единичный оператор $\hat{\mathbf{1}}_* = \int_{\Omega_*} d\mathbf{k} |\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}|$ в подпространстве \mathcal{H}_* и единичный оператор $\hat{\mathbf{1}}_c = \int_{\Omega_*} d\mathbf{k} |\mathbf{k}, c\rangle \langle \mathbf{k}, c|$ в подпространстве \mathcal{H}_c . Благодаря унитарности отображения, которое задается оператором \hat{W}_c , сохраняется скалярное произведение векторов. В частности, это справедливо как для условия нормировки собственных решений на δ -функцию от квантовых чисел,

$$\begin{aligned} \delta(E - E') &= \langle \Psi_E | \Psi_{E'} \rangle = \int d\mathbf{r} \langle \Psi_E | \mathbf{r} \rangle \langle \mathbf{r} | \Psi_{E'} \rangle = \\ &= \int d\mathbf{r} \Psi_E^*(\mathbf{r}) \Psi_{E'}(\mathbf{r}) = \\ &= \int d\mathbf{r} d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \Phi_E^*(\mathbf{x}) w_c^\dagger(\mathbf{x}; \mathbf{r}) w_c(\mathbf{r}; \mathbf{x}') \Phi_E(\mathbf{x}') = \\ &= \int d\mathbf{x} d\mathbf{x}' \Phi_E^*(\mathbf{x}) \delta_*(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \Phi_E(\mathbf{x}') = \\ &= \int d\mathbf{x} \Phi_E^*(\mathbf{x}) \Phi_E(\mathbf{x}), \quad (4.24) \end{aligned}$$

так и для условия полноты базиса из соответствующих собственных решений в соответствующем подпространстве. Отметим, что хотя подпространства \mathcal{H}_* и \mathcal{H}_c эквивалентны в том смысле, что между их векторами существует взаимнооднозначное соответствие, они не тождественны, так как состоят из разных векторов обобщенного гильбертова пространства. Поэтому вывод условий полноты требует менее элементарных средств, так что приведем только конечный результат:

$$\begin{aligned} \delta_c(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &= \int \mathcal{D}E \langle \mathbf{r} | \Psi_E \rangle \langle \Psi_E | \mathbf{r}' \rangle, \\ \delta_*(\mathbf{x} - \mathbf{x}') &= \int \mathcal{D}E \langle \mathbf{x} | \Phi_E \rangle \langle \Phi_E | \mathbf{x}' \rangle. \end{aligned} \quad (4.25)$$

Здесь $\mathcal{D}E$ означает интегрирование по дифференциальной спектральной мере, индексы у дельта-функций отмечают, что соответствующие выражения обладают всеми свойствами дельта-функции относительно элементов соответствующих подпространств.

Для решения вопроса о граничных условиях воспользуемся формулой (4.19). В работе [22] доказано, что с помощью отображения Гельфанда обобщенная функция Ваннье $w_c(\mathbf{r}; \mathbf{x})$ может быть выражена через стандартную функцию Ваннье³⁾

$$w_n(\mathbf{r}) = \int_{\Omega_*} \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^{3/2}} \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad (4.26)$$

формулой

$$w_n(\mathbf{r}; \mathbf{x}) = \Omega_0 \sum_{s=-\infty}^{\infty} w_n(\mathbf{r} - s\mathbf{a}) \delta_*(\mathbf{x} - s\mathbf{a}), \quad (4.27)$$

где a — постоянная решетки кубического кристалла, \mathbf{s} — вектор трехмерного пространства с целочисленными координатами.

Подстановка (4.27) в (4.19) дает

$$\Psi_E(\mathbf{r}) = \Omega_0 \sum_{s=-\infty}^{\infty} w_c(\mathbf{r} - s\mathbf{a}) \Phi_E(s\mathbf{a}). \quad (4.28)$$

Функция Ваннье $w_c(\mathbf{r})$ локализована в окрестности точки \mathbf{r} на масштабе порядка нескольких постоянных решетки [52], тогда как $\Phi_E(\mathbf{x})$ меняется слабо на таких расстояниях. Поэтому $\Phi_E(\mathbf{x})$ можно вынести из-под знака суммы при $s\mathbf{a} = \mathbf{r}$. Оставшаяся сумма

³⁾ Функция $w_n(\mathbf{r})$ отличается только постоянным множителем $\Omega_*/(2\pi)^{3/2}$ от обычного определения функции Ваннье через среднее значение $\psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ по зоне Бриллюэна (см., например, [51], формула (10.28)).

выражается через функцию Блоха при $\mathbf{k} = 0$ [22]. В результате имеем

$$\Psi_E(\mathbf{r}) = u_{c0}(\mathbf{r})\Phi_E(\mathbf{r}), \quad (4.29)$$

где $u_{c0}(\mathbf{r})$ — блоховская амплитуда для состояния на дне зоны проводимости. Видно, что нулевые граничные условия для обеих функций совпадают. Несмотря на внешнее сходство приближенной формулы (4.29) с формулой метода огибающих Латтинжера–Кона [53], функция Φ_E не совпадает с обычной огибающей, так как удовлетворяет другому уравнению (см. разд. II и IV в работе [53]).

Роль блоховской амплитуды при ненулевых граничных условиях, так же как интерпретация результатов подстановки приближенной формулы (4.29) в точные формулы данного раздела обсуждаются в работе [22], разд. 2.2.

Инвариантность скалярного произведения относительно отображения $\mathcal{H}_c \rightarrow \mathcal{H}_*$ влечет за собой также инвариантность матричных элементов самосопряженных операторов наблюдаемых. Убедимся в этом на примере важного для данной работы (с самосогласованными расчетами) оператора плотности электронов $\hat{n}(\mathbf{r}_0) = \delta(\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{r}_0)$.

Средняя плотность электронов в основном состоянии системы с точным гамильтонианом (4.7) дается формулой

$$n(\mathbf{r}_0) = \int \mathcal{D}E \varrho(E) n_E(\mathbf{r}_0), \quad (4.30)$$

где через $\varrho(E)$ и $n_E(\mathbf{r}_0)$ обозначены диагональные элементы одночастичной равновесной матрицы плотности и оператора плотности в базисе собственных функций $|\Psi_E\rangle$ самосопряженного оператора $H_0 + U'$. По определению

$$\begin{aligned} n_E(\mathbf{r}_0) &= \langle \Psi_E | \delta(\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{r}_0) | \Psi_E \rangle = \\ &= \int d\mathbf{r} \langle \Psi_E | \mathbf{r} \rangle \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \langle \mathbf{r} | \Psi_E \rangle = \\ &= \Psi_E^*(\mathbf{r}_0) \Psi_E(\mathbf{r}_0), \end{aligned} \quad (4.31)$$

где использовано представление функции от оператора координаты в базисе собственных функций последнего:

$$\hat{n}(\mathbf{r}_0) = \int d\mathbf{r} |\mathbf{r}\rangle \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \langle \mathbf{r}|. \quad (4.32)$$

При доказательстве инвариантности формулы (4.31) для $n_E(\mathbf{r}_0)$ относительно отображения $\mathcal{H}_c \rightarrow \mathcal{H}_*$ удобно воспользоваться абстрактной формой

записи отображения, обратного (4.19), и его эрмитово-сопряженного:

$$|\Phi_E\rangle = \hat{W}_c^\dagger |\Psi_E\rangle, \quad \langle \Phi_E| = \langle \Psi_E| \hat{W}_c. \quad (4.33)$$

Аналогичные соотношения имеются между векторами $|\mathbf{r}_c\rangle$ и $|\mathbf{x}\rangle$ — отображениями состояния $|\mathbf{r}\rangle$ на подпространства \mathcal{H}_c и \mathcal{H}_* :

$$\begin{aligned} |\mathbf{r}_c\rangle &= \int_{\Omega_*} d\mathbf{k} |\mathbf{k}, c\rangle \langle c, \mathbf{k} | \mathbf{r} \rangle, \\ |\mathbf{x}\rangle &= \int_{\Omega_*} d\mathbf{k} |\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k} | \mathbf{r} \rangle, \quad |\mathbf{x}\rangle = \hat{W}_c^\dagger |\mathbf{r}_c\rangle. \end{aligned} \quad (4.34)$$

Вставив единичный оператор (4.23) в (4.31) с учетом (4.33) и (4.34), получаем

$$\begin{aligned} n_E(\mathbf{r}_0) &= \int d\mathbf{r} \langle \Psi_E | W_c W_c^\dagger | \mathbf{r} \rangle \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \times \\ &\times \langle \mathbf{r} | W_c W_c^\dagger | \Psi_E \rangle = \langle \Phi_E | \mathbf{x}_0 \rangle \langle \mathbf{x}_0 | \Phi_E \rangle = \\ &= \Phi_E^*(\mathbf{x}_0) \Phi_E(\mathbf{x}_0). \end{aligned} \quad (4.35)$$

Здесь $|\mathbf{x}_0\rangle = \hat{W}_c^\dagger |\mathbf{r}_0\rangle$ и было учтено, что $\Psi_E \in \mathcal{H}_c$ и $\Phi_E \in \mathcal{H}_*$.

4.1.3. Уравнение Пуассона

Энергия Ферми E_F для заданной плотности $N = k_F^3/3\pi^2$ электронов на бесконечности при учете непараболичности спектра и обменно-корреляционного взаимодействия находится как решение уравнения

$$\begin{aligned} \frac{k_F^2}{2m_c^*} &= [E_F - U_{xc}(N)] \left(1 + \frac{E_F - U_{xc}(N)}{E_g} \right) = \\ &= E_F' \left(1 + \frac{E_F'}{E_g} \right). \end{aligned} \quad (4.36)$$

Входящий в эффективный потенциал обменно-корреляционный потенциал U_{xc} по-прежнему будет приниматься в обычном приближении локальной плотности. Как видно из приведенного выше рис. 2, пространственные распределения как квазидвумерных электронов, так и электронов в объемных состояниях непрерывного спектра вполне плавно меняются на масштабах порядка фермиевской длины волны. Принимая во внимание, что приближение локальной плотности позволяет проводить с хорошей точностью расчеты многоэлектронных атомов, молекул и поверхностных свойств металлов (см. обсуждение в [54]), мы в настоящей работе также ограничились стандартным определением U_{xc} .

В уравнении Пуассона (3.13) учет непараболичности электронного спектра приводит к изменению квазиклассического выражения для связи индуцированной плотности заряда с потенциалом. Вместо формулы (3.11) имеем

$$N_{ind}(\mathbf{x}) = \frac{k_F(\mathbf{x})^3}{3\pi^2} = \frac{(2m_c^*)^{3/2}}{3\pi^2} \times \left[[E'_F - U'(\mathbf{x})] \left(1 + \frac{E'_F - U'(\mathbf{x})}{E_g} \right) \right]^{3/2}. \quad (4.37)$$

4.2. Особенности расчета

В случае полубесконечного полупроводника с обогащенным слоем на поверхности уравнение (4.17) допускает разделение переменных \mathbf{r}_{\parallel} в плоскости и z по нормали к поверхности, так что решение можно искать в виде

$$\Phi_{E'}(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi} e^{i\mathbf{k}_{\parallel} \cdot \mathbf{r}_{\parallel}} \psi_{E', \mathbf{k}_{\parallel}}(z), \quad \mathbf{r} = (\mathbf{r}_{\parallel}, z). \quad (4.38)$$

Подставив это выражение в (4.17) и опустив коммутатор, получаем уравнение

$$\left[-\frac{1}{2m_c^*} \frac{d^2}{dz^2} + U_{qp}(z; E') \right] \psi_{E', \mathbf{k}_{\parallel}}(z) = \frac{1}{2m_c^*} k_z^2 \psi_{E', \mathbf{k}_{\parallel}}(z), \quad (4.39)$$

где параметр k_z связан с \mathbf{k}_{\parallel} и E' соотношением

$$\frac{1}{2m_c^*} (\mathbf{k}_{\parallel}^2 + k_z^2) = E' \left(1 + \frac{E'}{E_g} \right) \equiv K_2(E') \quad (4.40)$$

и введен зависящий от энергии квазипотенциал [22]

$$U_{qp}(z; E') = K_2(E') - K_2(E' - U') = U' \left(1 + \frac{2E'}{E_g} \right) - \frac{U'^2}{E_g}, \quad (4.41)$$

который удобен тем, что обращается в нуль на бесконечности вместе с $U'(z)$.

При решении уравнения (4.39) для каждого значения параметра k_{\parallel}^2 в диапазоне $0 \leq k_{\parallel}^2 \leq k_{max}^2$ ищется спектр собственных значений $k_z(k_{\parallel}^2)$. Если в квазипотенциальной яме, соответствующей взятому значению k_{\parallel}^2 , существует дискретный набор убывающих на бесконечности и нормируемых на единицу решений при некоторых отрицательных значениях $k_{zj}^2 < 0$, то соответствующие решения $E'_j(k_{\parallel}^2)$, $j = 0, 1, \dots$ уравнения (4.40) представляют собой размерно-квантованные подзоны энергетического спектра квазидвумерных электронов. Осциллирующие при $z \rightarrow \infty$ решения для $k_z^2 > 0$ отвечают состояниям непрерывного спектра трехмерных

электронов. Вследствие зависимости квазипотенциала (4.41) от энергии, для каждого набора значений (k_{\parallel}^2, k_z^2) получается своя потенциальная яма. Важно отметить, что при увеличении энергии E' глубина ямы монотонно растет, вследствие чего с ростом k_{\parallel}^2 уровни k_{zj}^2 монотонно углубляются (см. (4.41)). В результате, в отличие от параболического случая, двумерный спектр $E'_j(k_{\parallel})$ нетривиальным образом зависит от k_{\parallel}^2 , а в непрерывном спектре появляется зависимость от k_{\parallel}^2 собственных функций $\psi_{E', \mathbf{k}_{\parallel}}$.

В безразмерных переменных, аналогичных введенным ранее в разд. 3.2 (с уточнением $E_F^0 = k_F^2/2m_c^*$), уравнение (4.39) для полупроводника n -типа с обогащенным слоем на поверхности записывается в виде

$$\left[-\frac{d^2}{d\zeta^2} + u_{qp}(\zeta; \varepsilon) \right] \psi_{\tilde{k}_z, \tilde{\mathbf{k}}_{\parallel}}(\zeta) = \tilde{k}_z^2 \psi_{\tilde{k}_z, \tilde{\mathbf{k}}_{\parallel}}(\zeta), \quad (4.42)$$

где $\zeta = k_F z$, $\tilde{\mathbf{k}} = \mathbf{k}/k_F$, $\varepsilon = E'/E_F^0$, $u_{qp} = U_{qp}/E_F^0$ и

$$\tilde{k}_z^2 = \left[\varepsilon \left(1 + \frac{\varepsilon}{\varepsilon_g} \right) - \tilde{k}_{\parallel}^2 \right], \quad (4.43)$$

где $\varepsilon_g = E_g/E_F^0$.

Граничные условия к уравнению (4.42) аналогичны случаю параболической зоны проводимости (см. (3.20) и (3.23)). Для электронных состояний непрерывной области спектра имеем

$$\begin{aligned} \psi_{\tilde{k}_z, \tilde{\mathbf{k}}_{\parallel}}(0) &= 0, \\ \lim_{\zeta \rightarrow \infty} \psi_{\tilde{k}_z, \tilde{\mathbf{k}}_{\parallel}}(\zeta) &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin \left(\tilde{k}_z \zeta + \gamma_{\tilde{k}_z, \tilde{\mathbf{k}}_{\parallel}} \right), \quad (4.44) \\ \tilde{k}_z &> 0, \end{aligned}$$

где $\gamma_{\tilde{k}_z, \tilde{\mathbf{k}}_{\parallel}}$ опять обозначает постоянную фазу волновой функции в глубине полупроводника. Для нормированных на единицу локализованных состояний дискретного спектра

$$\psi_{j, \tilde{\mathbf{k}}_{\parallel}}(0) = 0, \quad \lim_{\zeta \rightarrow \infty} \psi_{j, \tilde{\mathbf{k}}_{\parallel}}(\zeta) = 0. \quad (4.45)$$

После определения собственных функций уравнения эффективной массы вычисляется полная плотность электронов, которая дается выражением

$$n(\zeta) = 3\pi^2 \left[\int_0^1 \frac{d\tilde{k}_z}{2\pi} \int_0^{\sqrt{1-\tilde{k}_z^2}} d\tilde{k}_{\parallel}^2 |\psi_{\tilde{k}_z, \tilde{\mathbf{k}}_{\parallel}}(\zeta)|^2 + \frac{1}{2\pi} \sum_{\tilde{k}_{zj}^2(0) \leq 0} \int_0^{\tilde{k}_{jmax}^2} d\tilde{k}_{\parallel}^2 |\psi_{j, \tilde{\mathbf{k}}_{\parallel}}(\zeta)|^2 \right], \quad (4.46)$$

где \tilde{k}_{jmax}^2 находится из решения уравнения

$$k_{jmax}^2 + k_{zj}^2(k_{jmax}^2) = \varepsilon_F(1 + \varepsilon_F/\varepsilon_g).$$

Структура формулы (4.46) соответствует таковой формулы (3.24), только учитывает явную зависимость решения $\psi_{\tilde{k}_z, \tilde{k}_\parallel}(\zeta)$ от \tilde{k}_\parallel^2 . Вследствие этого, интегрирование по k_\parallel , которое в случае параболической зоны выполнено в (3.24) аналитически, в случае непараболического энергетического спектра должно быть реализовано в (4.46) численно наряду с интегрированием по k_z .

Вследствие возможного существования очень мелкого уровня в квазипотенциальной яме может возникнуть необходимость вычислять плотность электронов при очень больших ζ . Из асимптотики (4.44) видно, что в этом случае подынтегральное выражение в первом слагаемом в (4.46) будет очень быстро осциллирующей функцией от k_z . Однако используемый в расчетах набор равноотстоящих значений k_z будет избыточным для большей части значений ζ , если его выбирать по критерию достаточной точности квадратурной формулы Симпсона при очень больших значениях ζ . Периодичность $\psi_{\tilde{k}_z, \tilde{k}_\parallel}(\zeta)$ от k_z при больших ζ позволяет аппроксимировать интеграл по k_z более мощной, чем формула Симпсона, квадратурной формулой Филона (см., например, [42]). Однако предварительное интегрирование в (4.46) по k_\parallel разрушает точную периодичность по k_z получающегося выражения. Для устранения этой трудности при вычислении $n(\zeta)$ в случае больших значений ζ порядок интегрирования в (4.46) менялся на обратный.

Безразмерное уравнение Пуассона остается неизменным:

$$\frac{d^2u}{d\zeta^2} + c_n n_{ind}(u) = c_n [1 - n_{qu}(\zeta)], \quad (4.47)$$

как и краевые условия к нему:

$$\left. \frac{du}{d\zeta} \right|_{\zeta=0} = \tilde{\varepsilon}, \quad \left. \frac{du}{d\zeta} \right|_{\zeta=\infty} = 0. \quad (4.48)$$

Формула для индуцированной плотности электронов следует из (4.37):

$$n_{ind}(\zeta) = \left[\varepsilon_F - u'(\zeta) \left(1 + \frac{\varepsilon_F - u'(\zeta)}{\varepsilon_g} \right) \right]^{3/2}. \quad (4.49)$$

Энергии и волновые функции связанных состояний в квантовой яме находились методом тригонометрической прогонки (см. детали в конце разд. 2.2

работы [2]). В отличие от параболического случая, когда обычный потенциал в уравнении Шредингера зависел только от координаты, в (4.39) квазипотенциал (4.41) зависит от координаты и от энергии состояния E' . С ростом k_\parallel^2 энергия растет, квантовая яма становится глубже. Это приводит к тому, что при определенных значениях волнового вектора k_\parallel начинают проявляться очень мелкие локализованные состояния.

Для нахождения таких уровней методом тригонометрической прогонки необходимо значительно увеличивать размер моделируемой области, что связано с вычислительными трудностями. С другой стороны, пропуск таких мелких уровней в самосогласованных расчетах приводит к «недобору» заряда в выражении (4.46) и к расходимости итерационного процесса. Поэтому анализ области энергий связи, близких к границе непрерывного спектра, проводился с использованием свойств решения при $k_z^2 = 0$.

В работе [22] (Приложение А.1) показано, что асимптотика решения ψ_{k_z} при $k_z = 0$ в окрестности бесконечности, где квазипотенциал стремится к нулю, есть либо константа (и тогда нуль есть собственное значение), либо монотонная функция координаты, поведение которой может быть использовано для обнаружения мелких связанных состояний. А именно, если в области, где квазипотенциал становится достаточно близок к нулю, выполняется условие

$$\text{sign} \left[\frac{d\psi_{k_z^2=0}}{d\zeta} \frac{d\psi_{k_z^2c}}{d\zeta} \right]_{\zeta_{max}} < 0, \quad (4.50)$$

то принимается, что в квантовой яме имеется мелкий уровень в интервале $(k_{zc}^2, 0)$.

Параметр k_{zc}^2 — это минимальная энергия, для которой метод тригонометрической прогонки обнаруживает локализованное состояние в нашем случае. В расчетах данного раздела при каждом фиксированном значении k_\parallel граничное условие (4.45) из бесконечности переносилось в точку $\zeta_{max} = 200$ в форме $d \ln \psi_{k_z, k_\parallel} / d\zeta = -|\tilde{k}_z|$. При этом значение k_{zc}^2 в безразмерных единицах оказывалось порядка $-5 \cdot 10^{-4}$. Приблизительно энергия замеченного мелкого уровня оценивалась как $k_{zsh}^2 = k_{zc}^2/2$, а в качестве соответствующей волновой функции в области расчетного интервала $0 \leq \zeta \leq \zeta_{max}$ бралось решение ψ_{k_z, k_\parallel} , отвечающее этой энергии. На границе ζ_{max} оно непрерывно продолжалось $\exp(-|k_z|\zeta)$ и затем нормировалось. (Подробнее см. Приложение А.)

Строго говоря, такое решение не является собственной функцией задачи, поскольку в точке ζ_{max}

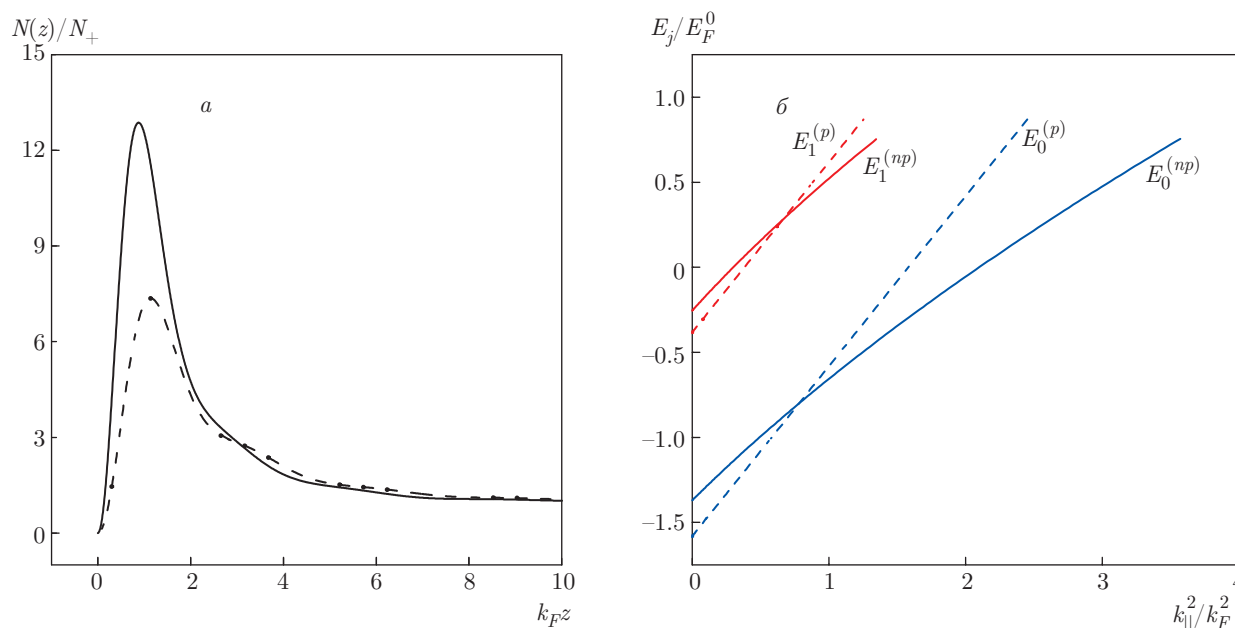


Рис. 7. *а)* Зависимость от координаты самосогласованной электронной плотности электронов. *б)* Двумерный закон дисперсии электронов в обогащенном слое. Сплошные кривые рассчитаны для непараболической зоны проводимости, штриховые — для параболической зоны в объеме полупроводника. В плотности электронов на рис. 7*а* учтен вклад состояний непрерывного спектра и двух размерно-квантованных подзон, показанных на рис. 7*б*. Расчет кривых на рис. 7*б* был выполнен только для заполненных электронами состояний, энергия которых не превышала энергию Ферми

оно имеет скачок первой производной. Однако в силу малости k_{zsh}^2 неправильное поведение решения на бесконечности мало сказывается на его значениях в области $0 < \zeta < \zeta_{max}$ согласно теореме Пуанкаре о непрерывной зависимости решения уравнения от параметра при сохранении граничного условия $\psi(0) = 0, d\psi/d\zeta(0) = 1$. Такой подход позволил с достаточной точностью учесть заряд мелкого уровня и обеспечил сходимость итерационного процесса по условию $\max_{\zeta} |n^{(i)} - n_{Poi}^{(i)}| < 2.0 \cdot 10^{-5}$.

4.3. Результаты и обсуждение

4.3.1. Распределение электронов около поверхности и особенности двумерного энергетического спектра

Самосогласованное решение уравнения Пуассона и уравнения эффективной массы с обменно-корреляционным потенциалом Кона–Шэма при учете непараболического закона дисперсии электронов в зоне проводимости проводилось с параметрами структур, которые экспериментально исследовались в работах [8, 9]. На рис. 7*а* представлены пространственные зависимости самосогласованной плотности электронов, рассчитанные для параболического и непараболического законов дисперсии с па-

раметрами $R_s^* = 0.32, m_c^* = 0.023, \varkappa = 12.55, E_F - U_0 = 400$ мэВ и шириной запрещенной зоны InAs 430 мэВ, которые соответствуют исследованной в работе [8] структуре Cs/InAs (значения E_g отвечают температурам $T < 80$ К). Как видно на рисунке, учет непараболичности закона дисперсии в зоне проводимости может приводить к значительному увеличению электронной плотности в области квантовой ямы. Причина этого — рост двумерной плотности состояний с энергией (см. ниже разд. 4.3.4).

Соответствующий спектр двух размерно-квантованных подзон показан на рис. 7*б*. Видно, что наибольшее различие двух законов дисперсии достигается при больших значениях квазиимпульса. Следует также отметить значительное различие предельных значений квазиимпульсов k_{Fj} , при которых энергия подзон равна энергии Ферми. Этот параметр напрямую определяется по периодам магнитоосцилляций Шубникова–де Гааза или $C-V$ -характеристик. На рис. 7*б* легко увидеть, что если использовать измеренные значения k_{Fj} без учета непараболичности двумерного закона дисперсии, это приведет к заметному углублению или повышению положения дна соответствующей подзоны в зависимости от используемого значения эффективной массы,

$m_j^*(0)$ или $m_j^*(\varepsilon_F)$.

Следует также обратить внимание на заметное различие координат концов соответствующих кривых по шкале ординат на рис. 7б и их общее положение ниже уровня $E/E_F^0 = 1$. В случае параболического спектра (штриховые кривые) в этом проявляется влияние обменно-корреляционного взаимодействия электронов на энергию Ферми. Несмотря на его заметную величину, в области $R_s^* < 1$ оно слабо влияет на форму потенциальной ямы и поэтому только смещает весь спектр по оси ординат вниз. В случае сплошных кривых к последнему добавляется еще вклад непараболичности спектра.

Экспериментально положение дна подзоны обычно измеряется относительно уровня Ферми. На рис. 7 видно, что соответствующие разности значительно различны в параболическом и непараболическом случаях.

4.3.2. Сравнение рассчитанного и измеренного энергетических спектров

На рис. 8 показаны рассчитанный нами энергетический спектр квазидвумерного электронного газа и экспериментально измеренная в работе [8] методом фотоэлектронной спектроскопии с угловым разрешением (ARPES) зависимость энергии основной подзоны двумерного спектра от k_{\parallel} . Авторы этой работы полагали, что на полученной ими сколом в вакууме чистой поверхности (110) полупроводника InAs загиб зон не имел места, а после нанесения на поверхность InAs слоя атомов Cs глубина потенциальной ямы на границе соответствовала $E_F - U_0 = 400$ мэВ. Однако мы получили, что расчет лучше описывает экспериментальные данные при глубине ямы $E_F - U_0 = 435$ мэВ.

Разница в 35 мэВ согласуется с возможной экспериментальной погрешностью в определении величины загиба зон на чистой поверхности методом фотоэлектронной спектроскопии при указанном в [8] разрешении по энергии 35 мэВ. Энергетический спектр фотоэлектронов измерялся в зависимости от угла вылета относительно нормали к поверхности в диапазоне $-3^\circ \leq \Theta \leq 3^\circ$ с угловым разрешением 0.5° . Для возбуждения фотоэмиссии использовалось синхротронное излучение с энергией кванта 8 эВ. Величина загиба зон на поверхности после нанесения Cs определялась по сдвигу фотоэмиссионного пика электронов, возбужденных из 4d-оболочки In, относительно его положения в случае чистой поверхности. Положение уровня Ферми в объеме полупровод-

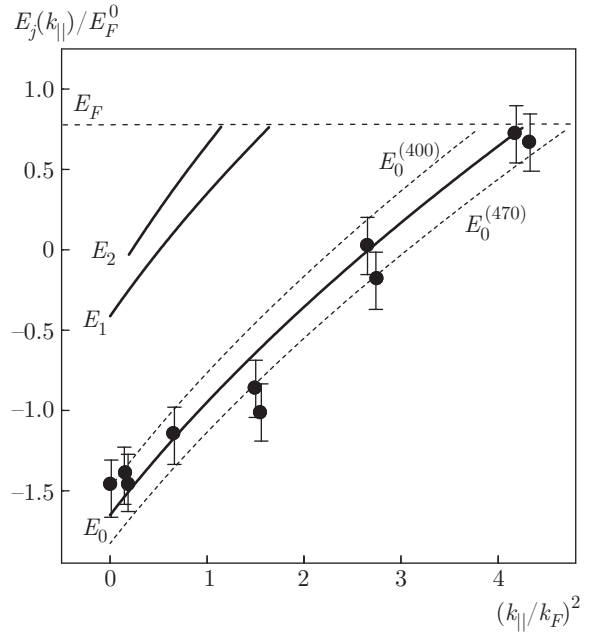


Рис. 8. Непараболический закон дисперсии подзон размерного квантования для структуры с обогащенным слоем на поверхности n -InAs при величине загиба зон $E_F - U_0 = 435$ мэВ (сплошные кривые). Темные кружки обозначают измеренные в работе [8] методом ARPES значения энергии электронов в основной подзоне при различных \tilde{k}_{\parallel} . Отметим, что третья подзона $E_2(\tilde{k}_{\parallel}^2)$ начинается при конечном значении квазиимпульса $k_{\parallel}^2 = 0.19$. Метки $E_0^{(400)}$ и $E_0^{(470)}$ около штриховых кривых обозначают, при каком загибе зон на поверхности относительно уровня Ферми рассчитана соответствующая кривая. $R_s^* = 0.32$

ника задавалось электрическим контактом с медным держателем образца.

Из представленных деталей проведения измерений ясно, что точное значение величины загиба зон после нанесения цезия зависит от значения потенциала, который имеет чистая поверхность. При этом, как известно, сам факт обращения в нуль волновых функций электронов на границе приводит к появлению самосогласованной потенциальной ямы на поверхности (см., например, работу [2], разд. 3.1). Поэтому было решено рассчитать электронный спектр поверхности n -InAs без адатомов цезия.

Чистой поверхности нейтрального в целом полупроводника отвечают следующие граничные условия к уравнению Пуассона (4.47):

$$\left(\frac{du'}{d\zeta}\right)_{\zeta=0} = 0, \quad \left(\frac{du'}{d\zeta}\right)_{\zeta=\infty} = 0.$$

В случае n -InAs при $N_+ = 3 \cdot 10^{17} \text{ см}^{-3}$ расчет самосогласованного потенциала для чистой поверхности

полупроводника с учетом обменно-корреляционного взаимодействия дает значение $E_F - U_0 = 87.1$ мэВ, что соответствует загибу зон $U_0 = -32.5$ мэВ. В такой потенциальной яме минимум единственной подзоны находится на 0.64 мэВ ниже границы непрерывного спектра, что не может быть обнаружено в условиях измерений с разрешением 35 мэВ [8].

Из этих оценок следует, что декларированное в работе [8] отсутствие загиба зона на чистой поверхности InAs после скола в вакууме могло быть установлено только с такой точностью, которая позволяет допустить существование начального загиба зон порядка 35 мэВ. Соответственно, уменьшение потенциала поверхности на 400 мэВ, измеренное при нанесении монослоя Cs, означает, что для загиба зон на поверхности в этих условиях можно принять 435 мэВ. Проведенное сопоставление совокупности экспериментальных данных с расчетом позволяет также предположить, что найдено первое экспериментальное доказательство существования около поверхности проводника самоорганизующейся потенциальной ямы Константина–Шика [3].

4.3.3. Особенности расчета спектра возбужденной подзоны, минимум которой расположен вблизи границы непрерывного спектра

На рис. 8 обращает на себя внимание закон дисперсии третьей подзоны $E_2(\tilde{k}_{\parallel}^2)$, которая появилась при расчете двумерного спектра для загиба зон в 435 мэВ. В отличие от спектральных кривых $E_0(\tilde{k}_{\parallel}^2)$ и $E_1(\tilde{k}_{\parallel}^2)$, минимумы которых находятся в центре двумерной зоны Бриллюэна при $\tilde{k}_{\parallel} = 0$, минимальная энергия третьей подзоны E_2 соответствует $\tilde{k}_{z2} = 0$, но $\tilde{k}_{\parallel}^2 = 0.19$. При меньших значениях \tilde{k}_{\parallel} третье локализованное состояние в соответствующей потенциальной яме (4.41) не детектировалось.

Такого типа двумерный энергетический спектр уже возникал как результат расчетов в случае непараболической зоны проводимости и стал основой для гипотезы о существовании эффекта, получившего название Motional binding [55], Kinetic confinement [56], или «кинематически связанные» состояния [57]. Для наглядного его объяснения используются модели полупроводниковых структур с эффективной массой, зависящей от пространственных координат. При этом зависимость эффективной массы от энергии в случае непараболической зоны, как предполагают, в потенциальной яме можно трактовать как зависимость массы от координат,

где, таким образом, механизм «кинетического конфайнмента» реализуется «естественным путем».

Наш опыт таких расчетов с использованием однозонного уравнения эффективной массы для непараболической зоны проводимости не дает оснований ни для поддержки гипотезы о существовании двумерных подзон с минимумом при $k_{\parallel} \neq 0$, ни для интерпретации эффекта непараболическости как зависимости эффективной массы от координаты.

Что касается второго обстоятельства, то выведенное регулярным образом уравнение эффективной массы (4.39) очевидным образом содержит зависимость от энергии состояния в квазипотенциале, а не в операторе кинетической энергии в коэффициенте при второй производной волновой функции.

По поводу факта появления в численных расчетах двумерной подзоны с $k_{\parallel min} \neq 0$ следует сказать, что этот эффект всегда возникает тогда, когда появляются состояния с очень малой энергией связи $k_z^2 < 0$. Существует ряд объективных причин, которые затрудняют обнаружение состояний с малой энергией связи и увеличивают значение $k_{\parallel min}$, начиная с которого спектр такой подзоны становится возможным вычислить (подробнее см. Приложение А).

По мере улучшения техники обнаружения состояний с малой энергией связи в наших расчетах сначала удалось добиться сходимости итераций при некотором $k_{\parallel min}$ и тех параметрах потенциальной ямы, при которых появлялись подзоны с минимумом вблизи границы непрерывного спектра $k_z^2 = 0$, без чего расчет вообще не может быть закончен, а затем постепенно уменьшать значения $k_{\parallel min}$, хотя и не до нуля. Представленный на рис. 8 спектр третьей подзоны $E_2(k_{\parallel}^2)$ как раз имеет описанный вид, но его следует считать скорее артефактом расчета с ограниченной точностью, чем подтверждением гипотезы кинетического конфайнмента. Дополнительные аргументы в пользу такого утверждения отнесены в Приложение А.

4.3.4. Плотность состояний и полуэмпирическая формула для энергетического спектра двумерных подзон

Важной характеристикой электронного газа является плотность состояний $g(E)$. Для каждой из размерно-квантованных подзон существует парциальная плотность состояний $g_j(E)$. Удобно вместе со спектром $E_j(k_{\parallel}^2)$ рассматривать обратную функцию $k_{\parallel j}^2(E)$. Номер подзоны соответствует числу конечных нулей функции $\psi_{\tilde{k}_z \tilde{k}_{\parallel}}(\zeta)$, определенной уравне-

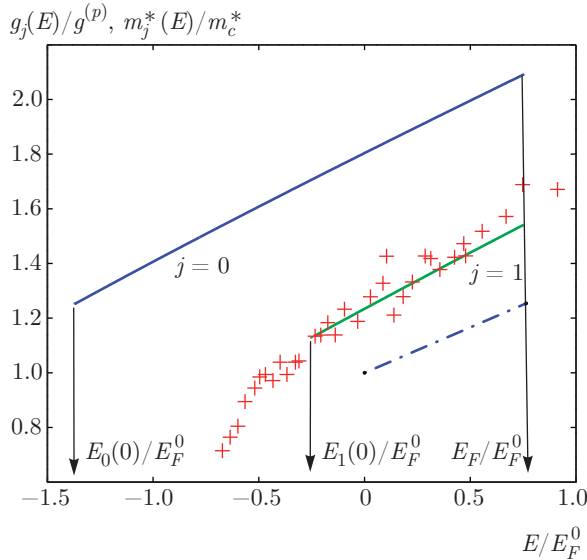


Рис. 9. Сплошные линии — безразмерная нормированная плотность состояний $g_j(\varepsilon)/g^{(p)} = d\tilde{k}_{\parallel j}^2/d\varepsilon$ в основной ($j = 0$) и первой возбужденной ($j = 1$) размерно-квантованных подзонах как функции энергии, рассчитанные численным дифференцированием энергетического спектра, представленного на рис. 7б. Загиб зон равен $E_F - U_0 = 400$ мэВ, $R_s^* = 0.32$. Стрелки отмечают положения минимумов подзон и энергию Ферми, которая вычислена с учетом обменно-корреляционного взаимодействия и непараболичности зоны проводимости. Сплошные линии также показывают зависимость от энергии нормированной эффективной массы $m_j^*(E)/m_c^*$ в подзонах (см. текст). Дополнительно построены рассчитанная по формуле (4.56) зависимость от энергии циклотронной эффективной массы $m_c^*(E)/m_c^*$ для электронов в объеме (штрихпунктир) и экспериментальная зависимость (кресты) эффективной массы от энергии, $m_0^*(E)/m_c^*$, в основной подзоне обогащенного слоя по данным Цуи [6] (магнитотуннельная спектроскопия). Все массы нормированы на эффективную массу на дне зоны проводимости

нием (4.42). В этих обозначениях с учетом двукратного вырождения по спину имеем

$$g_j(E) = 2 \int \frac{d^2 k_{\parallel}}{(2\pi)^2} \delta(E - E_j(\mathbf{k}_{\parallel})) = \frac{1}{\pi} \int dE' \frac{dk_{\parallel j}^2}{2dE'} \delta(E - E') = \frac{1}{2\pi} \frac{dk_{\parallel j}^2}{dE}. \quad (4.51)$$

В однозонном приближении, $E_g \rightarrow \infty$, энергетический спектр в подзонах параболический, $E_j(k_{\parallel}^2) = E_j(0) + k_{\parallel}^2/2m_c^*$, плотность состояний не зависит от энергии и будет обозначаться $g^{(p)} = m_c^*/\pi$.

На рис. 9 построены нормированные на плотность состояний параболической подзоны результа-

ты численного дифференцирования энергетического спектра двух размерно-квантованных подзон, показанных на рис. 7б.

Отметим существенные особенности полученных графиков. Во-первых, плотность состояний в подзонах линейно зависит от энергии, а не постоянна, как в параболическом случае, причем коэффициент наклона не зависит от номера подзоны. Во-вторых, в минимумах подзон эта плотность состояний превышает плотность состояний параболического приближения и тем больше, чем глубже расположена подзона.

Пользуясь определением и линейной зависимостью плотности состояний от энергии, которую представим в виде (параметр b не зависит от номера подзоны)

$$g_j(\varepsilon)/g^{(p)} = a_j + b[\varepsilon - \varepsilon_j(0)], \quad (4.52)$$

$$\varepsilon_j(0) = \varepsilon_j(\tilde{k}_{\parallel}^2|_{\tilde{k}_{\parallel}^2=0}),$$

можно решить соответствующее дифференциальное уравнение первого порядка относительно функции $d\tilde{k}_{\parallel j}^2(\varepsilon)/d\varepsilon$ и записать для каждой подзоны получающийся полином второй степени от ε в виде, аналогичном закону дисперсии Кэйна:

$$\tilde{k}_{\parallel j}^2(\varepsilon) = a_j [\varepsilon - \varepsilon_j(0)] \left(1 + \frac{b}{2a_j} (\varepsilon - \varepsilon_j(0)) \right). \quad (4.53)$$

Формула (4.53) приобретает еще большее сходство с выражением Кэйна (4.1), если принять во внимание, что определение (4.51) плотности состояний квазидвумерного газа с точностью до множителя $1/\pi$ совпадает с определением циклотронной эффективной массы $m_{cj}^*(E) = k_{\parallel j}(E) dk_{\parallel j}/dE$ в j -й подзоне. С учетом сказанного $a_j = m_j^*(0)/m_c^*$, что позволяет переписать выражение (4.53) в размерном виде с физически содержательными коэффициентами

$$\frac{k_{\parallel j}^2}{2m_j^*(0)} = [E - E_j(0)] \left[1 + \frac{E - E_j(0)}{E_{gj}^{(eff)}} \right], \quad (4.54)$$

где введена «эффективная» запрещенная зона

$$E_{gj}^{(eff)} = 2E_F^0 a_j/b. \quad (4.55)$$

Согласно оценкам параметров из рис. 9, имеем $a_0 = 1.25$, $a_1 = 1.12$, $b = 0.4$. При $E_F^0 = 71.5$ мэВ получаем $E_{g0}^{(eff)} = 447$ мэВ, $E_{g1}^{(eff)} = 400$ мэВ. Видно, что эти значения близки к объемной ширине запрещенной зоны $E_g = 430$ мэВ, но все же не совпадают с ней, как это иногда предполагают [45], и требуются их независимое определение. Такая попытка была

предпринята в работе [46] на базе несамосогласованного квазиклассического расчета и при некоторых предположениях относительно связи в каждой подзоне между эффективной массой и величиной эффективной запрещенной зоны. Представленные на рис. 6 работы [46] результаты расходятся с нашими качественно и количественно, что подчеркивает важность полного самосогласованного квантовомеханического рассмотрения.

Тожественность в безразмерной форме двумерной плотности состояний и циклотронной эффективной массы позволяет сравнить результаты нашего расчета с экспериментальной зависимостью от энергии эффективной массы электронов в основной подзоне обогащенного слоя n -InAs, измеренной Цуи методом магнитотуннельной спектроскопии [6]. Соответствующие точки построены на рис. 9 с использованием указанных в работе [6] параметров $m_c^* = 0.021$, $E_g = 410$ мэВ, $N = 5.4 \cdot 10^{17}$ см $^{-3}$, $E_F = 95$ мэВ.

На рис. 9 видно, что в безразмерных координатах данные измерений и расчета близки, несмотря на некоторое отличие параметров реальных образцов от использованных нами в расчетах. В измеренном наборе данных точно так же просматривается линейная зависимость эффективной массы от энергии, за исключением начального участка вблизи дна подзоны.

Отметим, что в работе [8] авторы также попытались определить эффективную массу на дне основной подзоны по измеренной дисперсии $E_0(k_{||})$. Однако, аппроксимируя экспериментальный набор точек параболой, получили $m_0^*(E_0(0)) = 0.05$. Это значение заметно превышает оценку двумерной эффективной массы на дне основной подзоны, которую можно получить из графика на рис. 9: $m_0^*(E_0(0)) = 1.25m_c^* = 0.029$. Такое различие объясняется, по-видимому, тем, что параметры аппроксимирующей параболы в значительной мере определялись результатами измерений при больших энергиях, где масса больше. Действительно, согласно рис. 9, получаем $m_0^*(E_F)/m_c^* \simeq 2.1$.

Переход от плотности состояний к циклотронной эффективной массе позволяет нам также сравнить зависимость массы от энергии для двух непараболических законов дисперсии — двумерного и трехмерного в объеме полупроводника. В случае Кэйн-овского закона дисперсии для циклотронной эффективной массы трехмерных электронов имеется выражение [58]

$$\frac{m_c^{*(3D)}(\varepsilon)}{m_c^*} = 1 + \frac{2\varepsilon}{\varepsilon_g}. \tag{4.56}$$

Соответствующая зависимость построена на рис. 9 штрихпунктиром для принятых нами значений параметров. Видно, что хотя объемная циклотронная масса тоже линейно зависит от энергии, наклон $2E_F^0/E_g = 0.333$ соответствующей прямой заметно меньше наклона $b = 0.4$ в случае двумерного непараболического спектра.

В заключение отметим, что в работе Кэйна [32] применимость двухзонного дисперсионного уравнения связывалась с выполнением неравенств $\Delta_{so} \gg \gg E_g, E$, где Δ_{so} — энергия спин-орбитального расщепления валентной зоны. Однако анализ трехзонного дисперсионного уравнения (10) из работы [32] показывает, что это неравенство можно существенно ослабить. Чтобы доказать это, запишем дисперсионное уравнение Кэйна в окрестности дна зоны проводимости в виде

$$\frac{k^2}{2m_c^*} = E \left(1 + \frac{E}{E_g} \right) \frac{1 + \frac{E}{E_g + \Delta_{so}}}{1 + \frac{E}{E_g + 2\Delta_{so}/3}}. \tag{4.57}$$

Множитель в виде дроби не меняет принципиально уравнение эффективной массы, и он мало отличен от единицы в области энергий $-E_g/2 < E \leq E_F$. Конкретно, при $E_g = 0.43$ эВ и $\Delta_{so} = 0.38$ эВ [59] для значений энергии Ферми и энергий связи из табл. 2 отличие этого множителя от единицы не более 5%, что лучше точности, с которой известны параметры полупроводника и получены экспериментальные данные.

4.3.5. Ортогональность собственных решений уравнения эффективной массы

Как уже отмечено в начале разд. 4.2, из-за зависимости квазипотенциала в уравнении (4.39) от собственного значения E каждой собственной функции отвечает своя потенциальная яма. Поэтому *a priori* нельзя предполагать, что множество собственных функций будет ортогональным. Несложные выкладки подтверждают, что ортогональности нет. А именно [22],

$$\langle \Phi_{E_2 k_{||2}} | \Phi_{E_1 k_{||1}} \rangle = \delta(\mathbf{k}_{||2} - \mathbf{k}_{||1}) \langle \psi_{E_2 \mathbf{k}_{||2}} | \psi_{E_1 \mathbf{k}_{||1}} \rangle \tag{4.58}$$

и

$$\langle \psi_{E_2 \mathbf{k}_{||}} | \psi_{E_1 \mathbf{k}_{||}} \rangle = \frac{2 \langle \psi_{E_2 \mathbf{k}_{||}} | U | \psi_{E_1 \mathbf{k}_{||}} \rangle}{E_1 + E_2 + E_g}. \tag{4.59}$$

Таблица 2. Значения загиба зон на поверхности и энергии минимумов подзон размерного квантования, вычисленные с учетом непараболичности зонного спектра и обменно-корреляционного взаимодействия для гетероструктуры Cs/InAs [8]. Все энергии отсчитаны от уровня Ферми, равного $E_F = 54.6$ мэВ

Образец	T, K	$U_0,$ мэВ	$E_0^{th},$ мэВ	$E_0^{exp},$ мэВ	$E_1^{th},$ мэВ	$E_2^{th},$ мэВ
InAs clean	0	87.1*	55.2	—	—	—
Cs/InAs	30	400	160	159 [†]	81	—
Cs/InAs	0	435*	173	—	84	48
Cs/InAs	0	470	185	—	88.1	83.7

Примечание. Знак «*» означает, что загиб зон вычислен нами либо из условия нейтральности образца в случае чистой поверхности, либо подбором лучшего положения рассчитанного спектра основной подзоны относительно измеренного (см. текст). Знаком «[†]» отмечено экспериментальное значение энергии минимума основной подзоны, определенное из графика фотоэлектронного спектра (вставка на рис. 2 в [8])

Неортогональность собственных функций уравнения (4.39), казалось бы, влечет за собой наличие недиагональных элементов у равновесной одночастичной матрицы плотности в этом базисе и усложнение формул для всех вычисляемых средних, таких, например, как формулы (4.30), (4.31) для плотности электронов.

Однако очевидно, что собственные функции $\Psi_E(\mathbf{r})$ исходной задачи (4.7) образуют ортогональный набор в силу самосопряженности оператора $H_0 + U$ в обобщенном гильбертовом пространстве. В разд. 4.1.2 с использованием унитарного отображения $\Psi_E(\mathbf{r})$ в $\Phi_E(\mathbf{x})$ доказано, что из взаимной ортогональности функций Ψ_E должна следовать взаимная ортогональность функций Φ_E . Переход от точной системы уравнений (4.10) к приближенной в результате отбрасывания недиагональных межзонных матричных элементов потенциала возмущения также не нарушает самосопряженности полученной системы уравнений (4.13). Но при преобразовании уравнения (4.17) к окончательному виду (4.39) был опущен коммутатор невозмущенного гамильтониана с потенциалом возмущения. В работе [22] доказано, что именно этот шаг порождает неортогональность собственных решений уравнения (4.39), тогда как собственные решения уравнения (4.17) взаимно ортогональны, а последовательный учет приближенных выражений для коммутатора во все больших порядках по малому параметру $\bar{k}^2/m_c^*E_g$ приводит ко все меньшим значениям интеграла перекрытия $\langle \psi_{E_1} | \psi_{E_2} \rangle$.

Из сказанного следует, что все формулы, в которые входят матричные элементы, должны быть изначально записаны в виде, соответствующем ор-

тонормированности точных решений $\Psi_{E_{k\parallel}}$ уравнения (4.7). Только для получения численных результатов в эти формулы надо подставлять решения $\Phi_{E_{k\parallel}}$ уравнения эффективной массы, взятого в нужном приближении по малому параметру $\bar{k}^2/m_c^*E_g$. Для количественной характеристики степени неортогональности решений, полученных в данной работе, результаты численного расчета интегралов перекрытия представлены в Приложении В.

Применение сформулированного выше правила, например, к выражению (4.30) для плотности электронов позволяет однозначно истолковать его как точную формулу, в которую могут быть подставлены неортогональные решения приближенного уравнения эффективной массы. Несоблюдение этого правила может приводить к ошибкам в численных оценках и физических выводах, как показывает следующий пример.

В работе [60] аналогичная неортогональность (формула (20)) решений приближенного уравнения эффективной массы (11) (см. там же (A1)) для полупроводника с непараболической зоной проводимости послужила основанием для расчета поглощения электронами инверсионного слоя электромагнитного излучения, поляризованного в плоскости слоя, за счет переходов $0 \rightarrow 1$ между состояниями основной подзоны и первой возбужденной (формулы (26) и (27) в [60]). Так как уравнение (A1) из [60] полностью соответствует нашему уравнению (4.6), а формула (20) из [60] — написанной выше (4.59), то в формуле (26) из [60] для вероятности поглощения множитель F_{\parallel} следует положить равным нулю, т. е. в принятом приближении поглощение нормальное падающего электромагнитного излучения долж-

но отсутствовать. И действительно, как отмечено в обзоре [61] (стр. 58, 59), сопоставление с экспериментом показывает, что расчеты типа проделанных в работе [60] переоценивают величину поглощения при нормальном падении по сравнению с измеряемым.

Можно предположить, что разумная оценка электронного поглощения нормально падающего излучения за счет межподзонных переходов будет получена, если выйти за рамки дипольного приближения для вероятности переходов или учесть недиагональные по зонным индексам матричные элементы потенциала в системе уравнений (4.10). Однако в последнем случае это приведет к появлению малых поправок порядка $(\hbar^2/m_c^*E_g)^4$ в однозонном уравнении эффективной массы [22] (разд. 3).

Доказанный выше запрет межподзонных переходов в присутствии электрического поля волны, поляризованной вдоль поверхности гетероструктуры, относится к случаю, когда для описания состояний в квантовой яме достаточно представить искомое решение в форме разложения по функциям Блоха зоны проводимости. «Многозонность» в разложении решения по функциям Латтинжера–Кона не означает реального смешивания состояний зоны проводимости и валентной в первом приближении по плавности потенциала ямы. Возможно, что в этом причина безуспешных экспериментальных попыток реализовать предсказываемое теоретически усиление поглощения при нормальном падении за счет непараболичности зоны проводимости [61] (Sec. VIII).

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Результаты разд. 3 показывают, что предложенный метод самосогласованного решения системы уравнений Кона–Шэма и Пуассона обеспечивает сходимость итерационного цикла даже в тех случаях, когда вблизи поверхности плотность квазидвумерных электронов в несколько раз превосходит плотность электронов в состояниях непрерывного спектра. Вместе с материалом работы [2] это доказывает универсальность и дает практически полное представление об особенностях применения предложенного метода к расчету основного состояния полуграниченных многоэлектронных систем. Существенно, что в обоих случаях найденные характеристики электронного газа оказались близки к определенным экспериментально, несмотря на модель-

ность постановки задачи и упрощенное описание обменно-корреляционного взаимодействия электронов.

В основе метода лежат предложенные в работе [1] два изменения обычной теории самосогласованных уравнений Кона–Шэма: 1) энергия основного состояния многоэлектронной системы как функционал плотности преобразована в функционал, зависящий не только от плотности электронов, но и от среднего электростатического потенциала; 2) в уравнении Пуассона выделен член нелинейного экранирования в квазиклассическом приближении. Первое изменение сделало средний потенциал, благодаря граничным условиям, независимой от электронов степенью свободы многоэлектронной системы, а уравнение Пуассона — одним из условий вариационной задачи на минимум функционала энергии.

Второе изменение обеспечивает сходимость итерационного алгоритма решения совместной системы одночастичных уравнений Шредингера и модифицированного уравнения Пуассона, в котором статическое экранирование учтено нелинейной квазиклассической формулой (3.11). В результате на каждом шагу итераций в процессе решения уравнения Пуассона с заданными краевыми условиями происходит самосогласование крупномасштабных неоднородностей плотности электронов и потенциала с учетом наложенных граничных условий. Самосогласование потенциала с мелкомасштабными неоднородностями электронной плотности типа фриделевских осцилляций или локализации электронов в состояниях дискретного спектра достигается в рамках обычной схемы последовательного уточнения решения.

В разд. 4 продолжена разработка итерационного метода решения самосогласованных уравнений Пуассона и Шредингера для случая, когда учет непараболического спектра зоны проводимости приводит к уравнению эффективной массы типа уравнения Шредингера с орбитально-зависимым потенциалом и меняет член нелинейного экранирования в уравнении Пуассона. Выявлены и устранены основные вопросы, которые возникают в процессе решения, в частности, неортогональность собственных решений приближенного уравнения эффективной массы и появление размерно-квантованной подзоны с энергией связи вблизи границы непрерывного спектра. В последнем случае обнаружен пороговый характер зависимости энергии связи от полной энергии квазидвумерных электронов. Получено, что учет поправки первого порядка по малому парамет-

ру $\bar{k}^2/m_c^*E_g$ к приближенному уравнению эффективной массы существенно сдвигает к нулю пороговое значение двумерного квазиимпульса, начиная с которого удается рассчитать спектр высоколежащей подзоны.

Для конкретного случая — обогащенный слой на поверхности сильнолегированного n -InAs — найден энергетический спектр с линейной зависимостью от энергии плотности состояний и эффективной массы квазидвумерных электронов. Показано количественное согласие с экспериментальными данными. Предложено аналитическое описание двумерного энергетического спектра в виде дисперсионного уравнения типа Кэйна для каждой подзоны, которое содержит два параметра — эффективную массу на дне подзоны и эффективную ширину запрещенной зоны. Этот результат может быть использован в кинетической теории явлений переноса в квазидвумерном электронном газе [62].

Отметим основные отличия количественных результатов расчета с учетом конечной ширины запрещенной зоны от часто используемого упрощенного расчета двумерного спектра для параболической зоны проводимости. Помимо линейной зависимости двумерной плотности состояний от энергии в первом случае и ее независимости во втором, сопоставление данных в табл. 1 и 2, а также кривых на рис. 7 показывает, что расчет в пренебрежении конечной шириной запрещенной зоны завышает энергию связи для минимумов подзон, занижая при этом значения соответствующего граничного квазиимпульса и плотности поверхностного заряда. Перечисленные особенности точного расчета с зависящим от энергии квазипотенциалом противоречат качественным выводам о влиянии непараболичности на двумерный спектр, которые сформулированы как следствия расчетов по эмпирической двухзонной модели с зависящей от энергии эффективной массой (см. [61], стр. 41 и [63]).

Обращает также на себя внимание согласие результатов расчета и модельной подгонки фотоэмиссионных спектров в табл. 1, когда в обоих случаях используется параболическое приближение для зоны проводимости. Такое согласие обычно трактуется как оправдание возможности пренебречь конечной шириной запрещенной зоны. Однако результаты разд. 4 показывают, что эти совпадающие значения могут значительно отличаться от реальных.

Финансирование. Работа выполнена в рамках государственного задания и частично поддер-

жана Российским фондом фундаментальных исследований (проекты №№ 10-02-00869, 13-02-01238 и 16-02-00583).

Благодарности. Один из авторов (А. Я. Ш.) благодарен А. Л. Мусатову за разъяснение особенностей экспериментальной техники фотоэлектронной спектроскопии и комментариев к соответствующим разделам работ [8,9], В. А. Волкову за обсуждение деталей метода эффективной массы в многозонном случае, проблем с граничными условиями к огибающим функциям на поверхности кристалла, возможность ознакомиться с соответствующими разделами его диссертации [64] и ссылку на статью Келдыша [40] в связи с проблемой учета непараболичности зоны проводимости, а также В. В. Сироткину за ссылки [24, 25].

ПРИЛОЖЕНИЕ А

Проблема сходимости итераций к самосогласованному решению при наличии мелкого уровня

А.1. Влияние состояний с малой энергией связи на сходимость итераций

Решение системы самосогласованных уравнений эффективной массы и Пуассона подразумевает, что необходимо найти не только спектр собственных значений задачи для заданной потенциальной ямы, но и учитывать, как влияет на потенциал распределение электронов по состояниям, которые отвечают найденному спектру. Итеративное решение считается полученным, если после очередного цикла итераций характеристики системы отличаются от исходных характеристик перед циклом в пределах допустимых ошибок. Устойчивость полученного решения означает, что дальнейшие итерации оставляют решение неизменным в пределах коридора ошибок.

Для электронного газа в обогащенном слое сформулированный критерий задает очень жесткие требования к выполнению асимптотического условия локальной нейтральности при уходе на бесконечность по нормали к поверхности. Небольшие отклонения от нейтральности вдали могут приводить к существенным изменениям решения в области потенциальной ямы из-за чувствительности собственных функций дискретного спектра к асимптотической форме потенциала.

Критически важными становятся указанные обстоятельства, если в обогащенном слое имеется локализованное состояние с малой энергией связи. Та-

ким состояниям соответствует большая протяженность области, где волновая функция электронов заметно отлична от своего значения на бесконечности. Поэтому чем мельче уровень, тем на больших расстояниях от поверхности надо находить потенциал и электронную плотность, чтобы достичь необходимой точности выхода на асимптотическое поведение.

Если в пределах расчетного интервала с достаточной точностью не происходит выход потенциала на асимптотику и не выполняется условие локальной нейтральности в бесконечности, то итерационный процесс перестает сходиться. В случае параболической зоны проводимости такая ситуация реализуется лишь в малой окрестности определенных значений глубины потенциальной ямы (см. рис. 3 и 4) и может быть проигнорирована, если интересует общий ход соответствующих кривых.

Однако проблема становится острой в непараболическом случае, когда мелкие уровни нужно находить в целой области значений k_{\parallel} при расчете двумерного спектра для некоторой глубины ямы U_0 . На первый взгляд, вклад n_{sh} мелкого состояния в полную плотность электронов мал, и его не обязательно учитывать, поскольку длина локализации соответствующей волновой функции $\zeta_{sh} \gg 1$ и из-за нормировки связанного состояния на единицу $n_{sh} \sim 1/\zeta_{sh} \ll 1$.

Оказалось, что такой подход приводит к расходимости всего итерационного процесса по двум причинам. Во-первых, появление нового связанного состояния меняет поведение всех волновых функций непрерывного спектра вплоть до энергии Ферми за счет образования у них дополнительного узла в области ямы и соответствующего уменьшения их вклада в плотность электронов.

Во-вторых, образуется не одно связанное состояние, а двумерная подзона, которая заполнена до уровня Ферми и содержит конечное число квазидвумерных электронов. Именно эти электроны должны компенсировать уменьшение плотности электронов в состояниях непрерывного спектра (см. рис. 2).

В результате без учета вклада мелкой подзоны в полную плотность вдали от поверхности возникал «недобор» заряда электронов, который создавал на следующей итерации после решения уравнения Пуассона самосогласованный потенциал со значительно уширенной квантовой ямой. В такой яме возникает уже большое количество мелких дискретных состояний, пренебрежение вкладом которых ведет к дальнейшему увеличению области ямы, в которой система не является электронейтральной, и к расходимости всего итерационного процесса.

После выяснения описанной картины нарушения сходимости итераций стало понятно, что необходимо выявлять мелкие уровни и учитывать их вклад, как только для заданного значения k_{\parallel} поведение решения при $k_z^2 = 0$ укажет на существование связанного состояния с $k_{zj}^2 < 0$. Соответствующая часть вычислительной процедуры была разработана с использованием исследованных в работе [22] свойств решения уравнения (4.42) при $\tilde{k}_z^2 = 0$ и кратко описана в конце разд. 4.2.

Основным инструментом выявления решения уравнения (4.42) с малой энергией связи $\tilde{k}_z^2 \lesssim 0$, которое следовало учесть, был анализ поведения решения $\psi_{0\tilde{k}_{\parallel}}$ для $\tilde{k}_z^2 = 0$ при заданном значении \tilde{k}_{\parallel}^2 . Если асимптотика функции $\psi_{0k_{\parallel}}(\zeta)$ выходит на постоянное значение в области $\zeta \lesssim \zeta_{max}$ (кривая 1 на рис. 10а), то принимается, что $\tilde{k}_z^2 = 0$ есть собственное значение и соответствующее значение $\tilde{k}_{\parallel t}$ является пороговым, начиная с которого становится возможным вычислять энергетический спектр очередной подзоны размерного квантования при всех $\tilde{k}_{\parallel} > \tilde{k}_{\parallel t}$. При этом два узла функции $\psi_{00}(\zeta)$ в области ямы (рис. 10а, кривая 1) свидетельствуют о наличии двух нижележащих дискретных уровней в квазипотенциальной яме U' (рис. 10а, кривая 3), что означает существование нормальных основной и первой возбужденной подзон $E_0(k_{\parallel})$ и $E_1(k_{\parallel})$ (см. рис. 8) и отсутствие обнаружимого третьего уровня в области $0 \leq k_{\parallel} < k_{\parallel t}$.

Если $\tilde{k}_z^2 = 0$ не есть собственное значение, то асимптотика решения $\psi_{0\tilde{k}_{\parallel}}(\zeta \rightarrow \infty)$ представляет собой монотонно растущую (линейно или логарифмически) функцию (рис. 10а, кривая 2). При выполнении условия $\psi_{0\tilde{k}_{\parallel}}(\zeta_{max}) \cdot \psi'_{0\tilde{k}_{\parallel}}(\zeta_{max}) > 0$ считалось, что график функции $\psi_{0\tilde{k}_{\parallel}}(\zeta)$ больше не пересекает ось абсцисс. Следовательно, нет мелкого уровня, вклад которого надо учитывать, чтобы компенсировать искажения волновых функций вышележащих состояний непрерывного спектра.

Обратное неравенство указывало, что за пределами расчетного интервала $[0, \zeta_{max}]$ находится еще один (и только один) узел решения $\psi_{0\tilde{k}_{\parallel}}(\zeta)$, который свидетельствует о наличии еще одного дискретного уровня с очень малой энергией связи. Выявление таким способом уровня с точкой поворота, лежащей за границей ζ_{max} расчетного интервала, задействовало описанный в разд. 4.2 алгоритм приближенного вычисления решения $\psi_{\tilde{k}_z \tilde{k}_{\parallel t}}(\zeta)$ и его вклада в плотность электронов. Этот прием обеспечил сходимость итераций с принятой точностью.

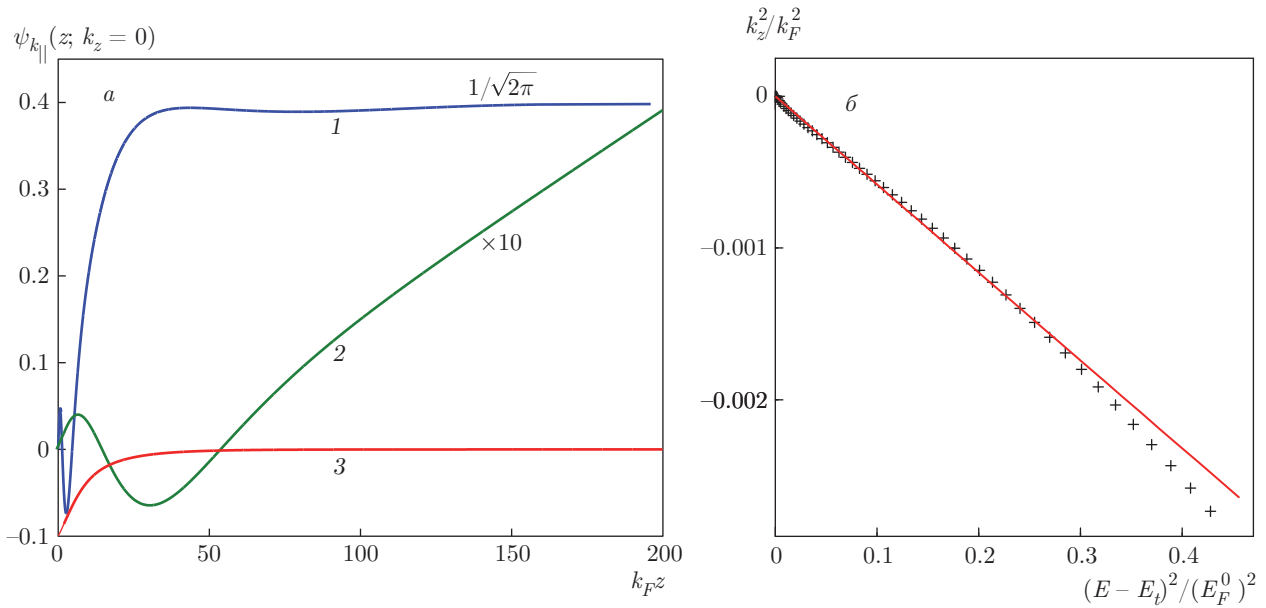


Рис. 10. а) Свойства решений уравнения эффективной массы вблизи порога рождения новой размерно-квантованной подзоны E_2 на рис. 8а. Волновые функции и квазипотенциал: 1 — нормированная на $\delta(k_z)$ собственная функция для нулевого собственного значения $k_z = 0$ при $k_{\parallel} = 0.45$; 2 — ненормированное решение уравнения эффективной массы для $k_z = 0, k_{\parallel} = 0$ при граничном условии $\psi(0) = 0, \psi'(0) = 1$; 3 — квазипотенциал, нормированный на $10U_{qp}(0)$. Ось абсцисс при построении кривых 2 и 3 растянута в 10 раз. б) Проявление порогового эффекта на зависимости энергии связи k_z^2 от глубины квазипотенциальной ямы, которая пропорциональна полной энергии E' двумерного состояния согласно формуле (4.41) для $U_{qp}(z; E')$: кресты — результат самосогласованного решения; сплошная линия построена по формуле (А.2). Через $E_t = 0.108E_F^0$ обозначено пороговое значение энергии, при котором начинает существовать третья двумерная подзона $E_2(\tilde{k}_{\parallel})$

Важно отметить, что значение квазипотенциала $U_{qp}(\zeta_{max}) < 0$ на границе определяет максимальное значение $\tilde{k}_z^2 < 0$, для которого решение $\psi_{\tilde{k}_z \tilde{k}_{\parallel}}$ будет иметь реальную точку поворота. При $\zeta > \zeta_{max}$ отличием U_{qp} от нуля пренебрегается, что означает наличие вертикальной потенциальной стенки от $U_{qp}(\zeta_{max})$ до нуля в точке ζ_{max} . Соответственно, все решения $\psi_{\tilde{k}_z \tilde{k}_{\parallel}}$ для $U_{qp} < \tilde{k}_z^2 < 0$ будут иметь точку поворота на этой стенке, и реальное значение энергии связи не может быть установлено точнее, чем ширина полоски $(U_{qp}(\zeta_{max}), 0)$.

А.2. Пороговые эффекты в двумерном спектре электронов обогащенного слоя

Как уже указывалось, квазипотенциал U_{qp} , входящий в уравнение (4.39), зависит от энергии E' . Энергетический спектр двумерных собственных состояний уравнения эффективной массы (4.17), сформированных только из функций Блоха зоны проводимости, определяется корнем $E_1(k)$ из (4.2) для каждой пары значений (k_{\parallel}^2, k_z^2) формулой $E'(k_{\parallel}) = E_1(k_{\parallel}^2 + k_z^2(k_{\parallel}^2))$, что накладывает усло-

вие $E'(k_{\parallel}) > -E_g/2$. Поэтому с ростом k_{\parallel} энергия растет, глубина квазипотенциальной ямы (4.41) увеличивается, и при некотором пороговом значении $k_{\parallel} = k_t$ в ней может появиться новое локализованное состояние. При дальнейшем увеличении k_{\parallel} потенциальная яма продолжает углубляться, увеличивается энергия связи и формируется очередная двумерная подзона.

Такое поведение двумерного спектра отмечалось ранее в работе [55] и послужило одним из доводов в пользу гипотезы о возможной локализации электрона за счет пространственной неоднородности эффективной массы [55, 56, 65]. Однако есть основания сомневаться, что квазидвумерный электронный газ в обогащенном слое на поверхности полупроводника с непараболической зоной проводимости может быть примером такой системы. Помимо соображений в пользу такой точки зрения, приведенных в разд. 4.3.2, отметим еще ряд чисто вычислительных проблем, которые надо учитывать при анализе результатов численных расчетов.

Прежде всего условимся называть дискретный уровень очень мелким, если нормировочный коэффициент соответствующей собственной функции формируется в асимптотической области за пределами расчетного интервала. Так как при $\zeta > \zeta_{max}$ полагаем $U_{qp}(\zeta) = 0$, в этой области $\psi_{\tilde{k}_z \tilde{k}_\parallel} \sim A \exp(-|\tilde{k}_z|\zeta)$ и нормировочный интеграл можно представить в виде

$$A^2 = \left[B^2 + \frac{1}{2|\tilde{k}_z|} \exp(-2|\tilde{k}_z|\zeta_{max}) \right]^{-1}, \quad (A.1)$$

$$B^2 = \int_0^{\zeta_{max}} d\zeta \left| \psi_{\tilde{k}_z \tilde{k}_\parallel} \right|^2.$$

Очевидно, что при фиксированном значении ζ_{max} и постоянстве начальных условий $\psi(0) = 0$, $\psi'(0) = 1$ условие мелкого уровня всегда наступит при достаточно малом $|\tilde{k}_z|$. С другой стороны, достаточно малые собственные значения $\tilde{k}_z^2 < 0$ всегда должны иметь место, когда речь идет о глубине потенциальной ямы, при которой в спектре появляется новая подзона.

Учитывая перечисленные выше факторы, которые ограничивают снизу возможность обнаружения состояния с малой энергией связи при конкретной реализации численного алгоритма, а также рост глубины квазипотенциальной ямы с ростом \tilde{k}_\parallel^2 , вполне естественно ожидать, что состояния вновь образовавшейся подзоны начинают обнаруживаться при конечном $\tilde{k}_\parallel^2 \neq 0$. Имеется или нет при этом для $\tilde{k}_\parallel = 0$ более мелкое связанное состояние, которое не удается обнаружить, требует специального анализа.

Есть еще одна причина, из-за которой величина \tilde{k}_\parallel^2 сдвигается в большую сторону. Сформулированное выше условие малости энергии связи одновременно означает, что зависимость энергии связи от параметра, определяющего глубину потенциальной ямы, будет носить пороговый характер [66, 67]. В данном случае можно показать, что зависимость собственного значения \tilde{k}_z^2 уравнения (4.39) от параметра E' в выражении (4.41) для квазипотенциала описывается формулой (в безразмерных величинах)

$$\tilde{k}_z^2 \left[1 + 2 \frac{\varepsilon_0 - \varepsilon_t}{1 + 2\varepsilon_0/\varepsilon_g} \tilde{I}^2 \right] = -(\varepsilon_0 - \varepsilon_t)^2 \tilde{I}^2. \quad (A.2)$$

Здесь введены обозначения для энергий (см. формулу (4.43)) $\varepsilon_0 = \varepsilon(0, \tilde{k}_\parallel^2)$, $\varepsilon_t = \varepsilon(0, \tilde{k}_t^2)$, матричного элемента потенциала

$$\tilde{I} = \frac{1}{\varepsilon_g} \int_0^\infty d\zeta \frac{\psi_t(\zeta)\psi_\varepsilon(\zeta)}{C_t C_\varepsilon} u'(\zeta)$$

и нормировочных констант $C_t = 1/\sqrt{2\pi}$, $C_\varepsilon = 2|\tilde{k}_z|$. Через ε_t обозначена энергия состояния с $\tilde{k}_z^2 = 0$ при пороговом значении квазиимпульса \tilde{k}_\parallel^2 . Для малых энергий вблизи порога выражение в квадратных скобках близко к единице. Это позволило оценить константу \tilde{I}^2 по наклону начального участка самосогласованного расчета и сравнить пороговую формулу (A.2) для энергии связи с результатом точного расчета, как показано на рис. 10б. Видно, что, поведение \tilde{k}_z^2 вблизи начала подзоны $E_2(\tilde{k}_\parallel)$ носит пороговый характер. Поэтому замедленное углубление \tilde{k}_z^2 с ростом \tilde{k}_\parallel в пороговой области увеличивает значение \tilde{k}_\parallel^2 , начиная с которого подзона $E_2(\tilde{k}_\parallel)$ проявляется в расчете.

Вторым обоснованием гипотезы «кинетического конфайнмента» послужило экспериментально обнаруженное замедленное заполнение электронами вновь образованной подзоны с ростом напряжения на затворе МОП-структур на основе *n*-InAs и HgCdTe ([45] Fig. 10, [46] Рис. 3, [57] Рис. 12).

Однако теория порогового эффекта тоже допускает такой характер формирования новой подзоны. И даже предсказывает зависимость от напряжения на затворе вида $(V_g - V_t)^2$, где V_t — значение порогового напряжения в момент появления новой подзоны. Квадратичная зависимость от расстройки, а также наблюдение аналогичного «замедления» при образовании новой подзоны в обогащенном слое на поверхности полупроводника с широкой запрещенной зоной и незначительной непараболичностью зоны проводимости могут позволить выбрать между двумя объяснениями этого эффекта.

Добавим еще, что уравнения эффективной массы и Пуассона являются экстремальными вариационной задачи на минимум функционала энергии основного состояния ([1] Eq. (62)). Состояние $\tilde{k}_z^2 = 0$, $\tilde{k}_\parallel^2 = 0$ обладает меньшей энергией, чем $\tilde{k}_z^2 = 0$, $\tilde{k}_\parallel^2 > 0$. Поэтому следует ожидать такой модификации формы самосогласованной потенциальной ямы, при которой минимум любой подзоны, включая близкую к непрерывному спектру, будет находиться при $\tilde{k}_\parallel^2 = 0$.

A.3. Влияние длины расчетного интервала на энергию связи мелкого уровня

Как объяснено выше, наличие в спектре мелкого уровня может разрушить сходимость итераций, если не принять меры к его обнаружению и учету. Од-

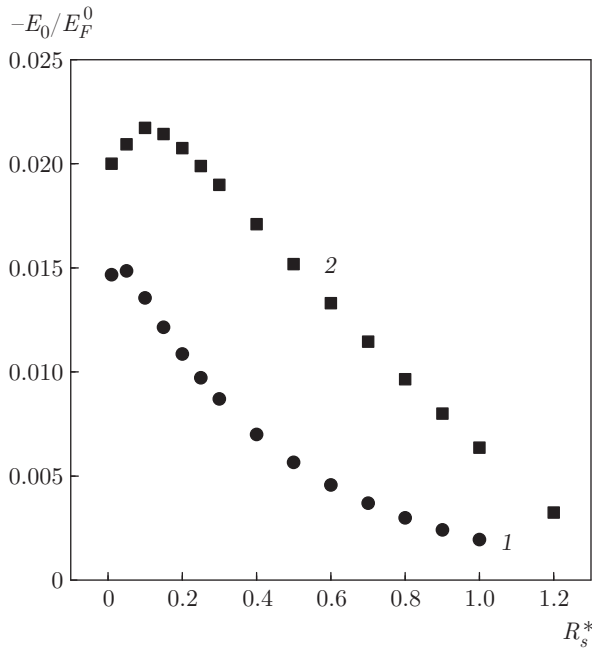


Рис. 11. Демонстрация зависимости энергии связи мелкого основного состояния от длины расчетного интервала. Построена зависимость от плотности положительного фона энергии электрона, локализованного в самосогласованной потенциальной яме Константина–Ширика вблизи бесконечно высокой потенциальной стенки. Кривая 1 получена при длине расчетного интервала 200 и остается практически неизменной при дальнейшем его увеличении. Кривая 2 была рассчитана в работе [2] при длине расчетного интервала 80. Энергия связи отсчитана от положения дна зоны проводимости с учетом вклада $U_{xc}(\infty)$

нако даже если сходимость достигнута, важно проверить независимость полученной энергии уровня от длины расчетного интервала. Особенно этот шаг необходим в тех случаях, когда в расчете появляется эффект «кинематического конфайнмента». Например, в работе [65] существование в обогащенном слое InAs подзоны с ненулевым начальным квазиимпульсом получено при слишком малой длине расчетного интервала $\zeta_{max} = 16$.

В подтверждение этой рекомендации на рис. 11 для параболической зоны проводимости построена рассчитанная зависимость энергии связи основного состояния от плотности положительного фона в самосогласованной потенциальной яме Константина–Ширика при двух длинах расчетного интервала. Заодно этим рисунком исправляется результат, недостаточно аккуратно полученный в работе [2] из-за вычислительных сложностей того времени при большой длине расчетного интервала.

Хотя качественно результаты обоих расчетов соответствуют примерно одной области концентрации электронов, в которой существует уровень, количественно величина энергии связи может различаться до трех раз, как видно из рис. 11. Поэтому одной только сходимости итерационной процедуры недостаточно, необходима проверка устойчивости результатов относительно увеличения ζ_{max} .

ПРИЛОЖЕНИЕ В

Оценка степени неортогональности собственных функций уравнения эффективной массы

Согласно формулам (4.58), (4.59), мерой неортогональности служит скалярное произведение $\langle \psi_{E_2 k_{\parallel}} | \psi_{E_1 k_{\parallel}} \rangle$ двух решений уравнения (4.39) при совпадающих k_{\parallel} , но разных энергиях E . В случае связанных состояний расчет этого скалярного произведения не представляет трудностей. Для собственных функций минимумов основной подзоны $\psi_{E_0 0}$ и первой возбужденной подзоны $\psi_{E_1 0}$ при $U_0 = 400$ мэВ получаем $\langle \psi_{E_1 0} | \psi_{E_0 0} \rangle = 0.051$. В вероятность поглощения нормально падающего на квазидвумерный электронный газ излучения войдет квадрат этого скалярного произведения [60] (формулы (26), (27)). Этим определяется порядок величины эффекта, полученного в работе [60], когда использовались неортогональные решения приближенного уравнения (4.39).

Формула (4.59) позволяет рассчитать степень неортогональности и в случае состояний непрерывного спектра без необходимости вычислять интегралы от функций с осциллирующей на бесконечности асимптотикой (4.44). Результаты показаны на рис. 12 для разных пар энергий $E_1 = E(k_{z1}, k_{\parallel})$ и $E_2 = E(k_z, k_{\parallel})$ при $k_{\parallel} = 0$ и $k_z^2 > 0$. Функция $E(k)$ здесь задана законом дисперсии (4.2) в зоне проводимости. Видно, что во всем квадранте $0 < k_z, k_{z1} \leq 1$ степень неортогональности меньше единицы, а ее квадрат не превышает оценки параметра малости, сделанной в конце разд. 4.1.1. Согласно работе [22], если необходима большая точность, однозонное уравнение метода эффективной массы может быть взято с учетом первой поправки (4.18) от коммутатора.

Также был проведен расчет скалярных произведений собственных функций непрерывного спектра в случае параболической зоны проводимости, рассмотренном в разд. 3, чтобы независимо от условия (3.25) оценить степень точности критерия оста-

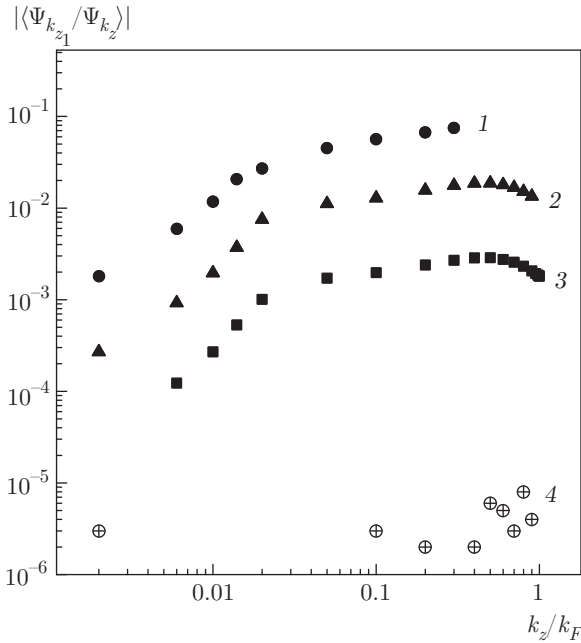


Рис. 12. Зависимости меры неортогональности самосогласованных собственных функций непрерывного спектра от волнового вектора. Номерами 1, 2, 3 обозначены скалярные произведения $\langle \Psi_{k_{z1}} | \Psi_{k_z} \rangle$ собственных функций однозонного уравнения эффективной массы (4.6) для непараболической зоны проводимости при $k_{z1} = 1.0$ (1); $k_{z1} = 0.01$ (2); $k_{z1} = 0.002$ (3). Точками 4 показаны значения скалярных произведений найденных численно собственных функций уравнения эффективной массы (3.1) для параболической зоны проводимости. В последнем случае расчет по формуле (В.6) показывает, что эти функции практически ортогональны

новки итерационного процесса. Поскольку задача (3.19), (3.20) самосопряженная, для проверки ортогональности надо вычислять скалярные произведения непосредственным интегрированием численно полученных решений.

Для компактности изложения перепишем уравнение (3.1) в упрощенном виде:

$$-\frac{1}{2}\Psi''_{k_z}(z) + \left[U(z) - \frac{1}{2}k_z^2 \right] \Psi_{k_z}(z) = 0. \quad (B.1)$$

Если потенциал $U(z \rightarrow \infty) = 0$, то δ -нормированные собственные функции непрерывного спектра $\Psi_{k_z}(z)$ для задачи на полуоси $0 \leq z < \infty$ имеют асимптотику

$$\lim_{z \rightarrow \infty} \Psi_{k_z}^{(\infty)}(z) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin(k_z z + \gamma_{k_z}), \quad (B.2)$$

где фаза γ_{k_z} численного решения определяется формулой (3.22).

Чтобы не искать численно предел регуляризованных интегралов

$$\langle \Psi_{k_{z1}} | \Psi_{k_z} \rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty \Psi_{k_{z1}}^*(z) \Psi_{k_z}(z) \exp^{-\epsilon z} dz, \quad (B.3)$$

через которые выражаются скалярные произведения в обобщенном гильбертовом пространстве [22] (формула (5.4)), используем прием выделения сингулярной части интегралов, предложенный в [22] (разд. 5.2.2.IV). Введем остаточную функцию $\Theta_{k_z}(z)$

$$\Theta_{k_z}(z) = \Psi_{k_z}(z) - \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sin(k_z z + \gamma_{k_z}). \quad (B.4)$$

Предполагается, что потенциал на бесконечности стремится к нулю достаточно быстро, чтобы были выполнены условия для существования асимптотики (B.2) с постоянными амплитудой и фазой [41] (Гл. III, § 9).

Формулы (B.2)–(B.4) позволяют при численном расчете скалярного произведения найти сингулярные вклады аналитически. Представим (B.3) в виде

$$\langle \Psi_{k_{z1}} | \Psi_{k_z} \rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^\infty \left(\Theta_{k_{z1}}(z) + \Psi_{k_{z1}}^{(\infty)}(z) \right)^* \times \left(\Theta_{k_z}(z) + \Psi_{k_z}^{(\infty)}(z) \right) \exp^{-\epsilon z} dz. \quad (B.5)$$

Интеграл от произведения двух асимптотик вычисляется явно и содержит как сингулярные члены $\delta(k_{z1} \pm k_z)$, так и несингулярные.

В итоге при $k_{1z} \neq k_z$ получаем искомую формулу для отклонения $\bar{\delta}$ от $\delta(k_{z1} - k_z)$ скалярного произведения собственных функций, найденных численно на отрезке $0 \leq z \leq L$:

$$\bar{\delta} = \int_0^L dz \Theta_{k_{z1}}(z) \Theta_{k_z}(z) + \int_0^L dz \Theta_{k_{z1}}(z) \Psi_{k_z}^{(\infty)}(z) + \int_0^L dz \Theta_{k_z}(z) \Psi_{k_{z1}}^{(\infty)}(z) - \frac{1}{\pi} \left[\frac{\sin(\Delta_{12}\gamma)}{\Delta_{12}k_z} - \frac{\sin(\Sigma_{12}\gamma)}{\Sigma_{12}k_z} \right], \quad (B.6)$$

где

$$\begin{aligned} \Delta_{12}k_z &= k_{z1} - k_z, & \Delta_{12}\gamma &= \gamma_{k_{z1}} - \gamma_{k_z} \\ \Sigma_{12}k_z &= k_{z1} + k_z, & \Sigma_{12}\gamma &= \gamma_{k_{z1}} + \gamma_{k_z}. \end{aligned}$$

Подстановка в интегралах конечного верхнего предела L вместо ∞ оправдана, если подынтегральные выражения содержат как минимум квадратично интегрируемые функции $\Theta_{k_z}(z)$. Нетрудно показать, составив уравнение для $\Theta_{k_z}(z)$, что достаточным условием для этого может служить квадратичная интегрируемость потенциала $U(z)$. При $k_{z1} \neq k_z$

все члены в (В.6) конечны и могут быть найдены численно. В случае самосопряженной задачи выражение (В.6) для $\bar{\delta}$ равняется нулю при любых сколь угодно близких значениях k_{z1}, k_z и может быть доопределено нулем по непрерывности при $k_{z1} = k_z$. Для задачи с орбитально-зависимым потенциалом или при подстановке в качестве собственных функций численно найденных решений величина $\bar{\delta}$ служит мерой неортогональности собственных функций непрерывного спектра.

Справедливость формулы (В.6) была проверена на собственных функциях непрерывного спектра при непараболической зоне проводимости сравнением с формулой (4.59) и прямым вычислением предела регуляризованных интегралов.

На рис. 12 точки 4 показывают зависимость скалярного произведения $\langle \Psi_{k_{z1}}(\zeta) | \Psi_{k_z}(\zeta) \rangle$ состояний непрерывного спектра от волнового вектора k_z при $k_{z1} = 1$, вычисленную для параболического закона дисперсии в зоне проводимости. Видно, что скалярное произведение равно нулю с точностью до численной ошибки порядка 10^{-6} , как и должно быть в этом случае согласно критерию (3.25) остановки итераций.

ЛИТЕРАТУРА

1. A. Ya. Shul'man, J. Phys.: Conf. Ser. **35**, 163 (2006).
2. Д. В. Посвянский, А. Я. Шульман, ЖЭТФ **136**, 169 (2009).
3. О. В. Константинов, А. Я. Шик, ЖЭТФ **58**, 1662 (1970).
4. J. A. Appelbaum and G. A. Baraff, Phys. Rev. Lett. **26**, 1432 (1971).
5. D. C. Tsui, Phys. Rev. Lett. **24**, 303 (1970).
6. D. C. Tsui, Phys. Rev. B **4**, 4438 (1971).
7. D. C. Tsui, Phys. Rev. B **8**, 2657 (1973).
8. V. Yu. Aristov, G. Le Lay, V. M. Zhilin et al., Phys. Rev. B **60**, 7752 (1999).
9. M. G. Betti, V. Corradini, G. Bertoni et al., Phys. Rev. B **63**, 155315 (2001).
10. T. Ando, A. B. Fowler, and F. Stern, Rev. Mod. Phys. **54**, 437 (1982) [Е. Андо, А. Фаулер, Ф. Стерн, *Электронные свойства двумерных систем*, Мир, Москва (1985)].
11. F. Stern, J. Comput. Phys. **6**, 56 (1970).
12. F. Stern, Phys. Rev. B **5**, 4891 (1972).
13. G. A. Baraff and J. A. Appelbaum, Phys. Rev. B **5**, 475 (1972).
14. D. H. Ehlens and D. L. Mills, Phys. Rev. B **34**, 3939 (1986).
15. G. Makov and M. C. Payne, Phys. Rev. B **51**, 4014 (1995).
16. C. W. M. Castleton, A. Höglund, and S. Mirbt, Phys. Rev. B **73**, 035215 (2006).
17. C. A. Rozzi, D. Varsano, A. Marini et al., Phys. Rev. B **73**, 205119 (2006).
18. A. F. Wright and N. A. Modine, Phys. Rev. B **74**, 235209 (2006).
19. A. Cerioni, L. Genovese, A. Mirone et al., J. Chem. Phys. **137**, 134108 (2012).
20. J. A. Appelbaum and D. R. Hamann, Rev. Mod. Phys. **48**, 479 (1976).
21. T. R. Durrant, S. T. Murphy, M. B. Watkins, and A. L. Shluger, J. Chem. Phys. **149**, 024103 (2018).
22. А. Я. Шульман, ЖЭТФ **158** (2020).
23. H. Übensee, G. Paasch, and J.-P. Zöllner, Phys. Rev. B **39**, 1955 (1989).
24. I.-H. Tan, G. L. Snider, L. D. Chang, and E. L. Hu, J. Appl. Phys. **68**, 4071 (1990).
25. A. Trellakis, A. T. Galick, A. Pacelli, and U. Ravaioli, J. Appl. Phys. **81**, 7880 (1997).
26. P. D. C. King, T. D. Veal, and C. F. McConville, Phys. Rev. B **77**, 125305 (2008).
27. M. G. Betti, V. Corradini, V. De Renzi et al., Sol. St. Comm. **110**, 661 (1999).
28. A. E. Mattsson, P. A. Schultz, M. P. Desjarlais et al., Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. **13**, R1 (2005).
29. А. Я. Шульман and Д. В. Посвянский, J. Phys.: Conf. Ser. **510**, 012029 (2014).
30. Д. В. Посвянский, А. Я. Шульман, в сб. *Тезисы докл. XII Росс. конф. по физике полупроводников — Полупроводники-2015*, Москва, Физический институт им. П. Н. Лебедева РАН (2015), с. 248.
31. W. Franz, *Dielektrische Durchschlag, Handbuch der Physik*, Band XVII, S. 155, Springer, Berlin (1956) [В. Франц, *Пробой диэлектриков*, Изд-во иностр. лит., Москва (1961)].
32. E. O. Kane, J. Phys. Chem. Sol. **1**, 249 (1957).

33. P. N. Butcher, J. A. Hulbert, and K. F. Hulme, J. Phys. Chem. Sol. **21**, 320 (1961).
34. J. W. Conley and G. D. Mahan, Phys. Rev. **161**, 681 (1967).
35. А. Я. Шульман и В. В. Зайцев, Sol. St. Comm. **18**, 1623 (1976).
36. И. Н. Котельников, И. Л. Бейнихес, А. Я. Шульман, ФТТ **27**, 401 (1985).
37. И. Н. Котельников, Д. К. Чепиков, Е. Г. Чиркова, А. Я. Шульман, ФТП **21**, 1854 (1987).
38. I. N. Kotel'nikov and A. Ya. Shul'man, in Proc. 19th Int. Conf. on Phys. Semicond., Warsaw (1988), Vol. 1, p. 681.
39. T. Ando, J. Phys. Soc. Jpn. **54**, 2676 (1985).
40. Л. В. Келдыш, ЖЭТФ **45**, 364 (1963).
41. А. Мессиа, *Квантовая механика*, т. 1, Наука, Москва (1978).
42. М. Абрамовиц, И. Стигал, *Справочник по специальным функциям*, Наука, Москва (1975), Гл. 25, №№ 25.4.47 и 25.4.54.
43. В. Л. Коротких, А. Л. Мусатов, В. Д. Шадрин, Письма в ЖЭТФ **27**, 652 (1978).
44. O. Madelung, *Semiconductors: Data Handbook*, Springer, Berlin (2003).
45. H. Reisinger, H. Schaber, and R. E. Doezema, Phys. Rev. B **24**, 5960 (1981).
46. В. Ф. Раданцев, Т. И. Дерябина, Л. П. Зверев и др., ЖЭТФ **91**, 1016 (1986).
47. L. Ö. Olsson, C. B. M. Andersson, M. C. Näkansson et al., Phys. Rev. Lett. **76**, 3626 (1996).
48. Р. Курант, Д. Гильберт, *Методы математической физики*, т. 1, Гостехиздат, Москва–Ленинград (1933), Гл. VI, конец § 6.
49. Б. М. Левитан, И. С. Саргсян, *Введение в спектральную теорию*, Наука, Москва (1970), Гл. I, § 3.
50. W. Kohn and C. Majumdar, Phys. Rev. **138**, A1617 (1965).
51. Н. Ашкрофт, Н. Мермин, *Физика твердого тела*, т. 1, Мир, Москва (1979).
52. N. Marzari, A. A. Mostofi, J. R. Yates et al., Rev. Mod. Phys. **84**, 1419 (2012).
53. J. M. Luttinger and W. Kohn, Phys. Rev. **97**, 869 (1955).
54. W. Kohn, Rev. Mod. Phys. **71**, 1253 (1999).
55. R. E. Doezema and H. D. Drew, Phys. Rev. Lett. **57**, 762 (1986).
56. M. Kubisa and W. Zawadzki, Semicond. Sci. Technol. **8**, S246 (1993).
57. Г. М. Миньков, О. Э. Рут, А. В. Германенко, ЖЭТФ **112**, 537 (1997).
58. И. М. Цидильковский, *Зонная структура полупроводников*, Наука, Москва (1978), § 4.3.
59. I. Vurgaftman, J. R. Meyer, and L. R. Ram-Mohan, J. Appl. Phys. **89**, 5815 (2001).
60. W. Zawadzki, J. Phys. C **16**, 229 (1983).
61. M. Helm, in *Intersubband Transitions in Quantum Wells: Physics and Device Applications I*, ed. by H. C. Liu and F. Capasso, Acad. Press, London (2000) (Semiconductors and Semimetals, Vol. 62, Ch. 1).
62. А. Я. Шульман, в сб. *Тезисы докл. XIII Росс. конф. по физике полупроводников* (Екатеринбург, 2017), Институт физики металлов УрО РАН, с. 223.
63. D. F. Nelson, R. C. Miller, and D. A. Kleinman, Phys. Rev. B **35**, 7770(R) (1987).
64. В. А. Волков, *Диссертация . . . доктора физ.-матем. наук*, ИРЭ АН СССР, Москва (1987).
65. A. Zhang, J. Slinkman, and R. E. Doezema, Phys. Rev. B **44**, 10752 (1991).
66. А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике*, Наука, Москва (1971), с. 22.
67. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика*, Наука, Москва (1989), § 45, задача 1.