ЖЭТФ, 2007, том 131, вып. 3, стр. 518–524

ПОВЕРХНОСТНЫЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ, СОЗДАВАЕМЫЕ РЭЛЕЕВСКОЙ ВОЛНОЙ

С. И. Ханкина, В. М. Яковенко[*]

Институт радиофизики и электроники им. А. Я. Усикова Национальной академии наук Украины
61085, Харьков, Украина

И. В. Яковенко

Научно-исследовательский и проектно-конструкторский институт «Молния»
Министерства образования и науки Украины
61013, Харьков, Украина

Поступила в редакцию 29 мая 2006 г.

Исследуются электронные свойства полупроводника, ограниченного неровной стенкой, представляющей собой бесконечно высокий потенциальный барьер. Неровности стенки создаются рэлеевской звуковой волной. Показана возможность возникновения на границе полупроводника поверхностных электронных состояний (волн), законы дисперсии которых получены в условиях, когда электроны проводимости находятся либо в поле звуковой волны, либо вне его. Обнаружены области существования поверхностных электронных состояний, различающихся физическими свойствами. Эти области разделены запрещенной зоной, ширина которой определяется высотой неровностей.

PACS: 73.20.-r, 73.21.-b

1. ВВЕДЕНИЕ

Исследованию физических свойств поверхности твердого тела всегда уделялось большое внимание, поскольку поверхность является интересным и привлекательным объектом для науки и практики.

Для современной микро- и наноэлектроники представляет интерес изучение электронных процессов, происходящих на поверхности полупроводников, в частности, механизмов возбуждения поверхностных электронных состояний. Возможность существования поверхностных электронных состояний в ограниченных кристаллах впервые была показана еще в 1932 г. И. Таммом [1]. Позже (1939 г.) условия их возникновения детально изучались У. Шокли [2]. Эти результаты обобщены И. М. Лифшицем и С. И. Пекаром (1955 г.) для неполярных колебаний в решетке [3]. В обзоре [3] показано, что теория поверхностных электронных состояний имеет глубокую аналогию с теорией поверхностных колебаний атомов кристаллической решетки. В одномерном случае одна из ветвей энергетического спектра переходит в рэлеевские волны, другие образуют поверхностные оптические ветви. В 1965 г. К. Кливер и Р. Фукс обнаружили сходство поверхностных электронных состояний с поверхностными плазменными колебаниями [4]. В 1975 г. В. М. Агранович, Б. П. Антонюк, А. Г. Мальшуков исследовали процессы локализации электронно-дырочных пар (экситонов), обусловленных изгибными колебаниями поверхности [5]. Авторы работы [5] (см. также [6]) показали, что в квазиодномерных и квазидвумерных полупроводниках кулоновское притяжение между электронами и дырками, находящимися на различных плоскостях или нитях, приводит к их деформации. В результате в области возникшей деформации происходит автолокализация экситона как целого. Этот эффект может привести к неустойчивости основного состояния полупроводника.

Обстоятельный обзор работ, посвященный теоретическому и экспериментальному исследованию свойств поверхности и границ раздела полупроводников, изложен в книге [7].

Нами в работах [8–10] определены поверхност-

[*]E-mail: yavm.@ire.kharkov.ua

ные электронные состояния на границе полупроводник–вакуум в присутствии либо δ-образного потенциала, либо регулярных или случайных шероховатостей. При этом поверхностные электронные состояния приводят к образованию неоднородного приграничного плазменного слоя и к существенному изменению закона дисперсии поверхностных электромагнитных колебаний [11].

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ (ИСХОДНЫЕ УРАВНЕНИЯ И ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ)

В настоящем сообщении показана возможность возникновения электронных поверхностных состояний на периодических неровностях границы, создаваемых рэлеевской звуковой волной, в поле которой находятся электроны проводимости.

Пусть вдоль поверхности $y = y_0(x,t)$ в направлении оси x распространяется звуковая (рэлеевская) волна с частотой Ω и волновым вектором $\mathbf{q}$. Вдоль оси z система однородна. Под действием поля этой волны поверхность изгибается и ее зависимость от координаты x и времени может быть описана следующей функцией:

$$y_0(x,t) = \zeta \cos(qx - \Omega t), \tag{1}$$

где $q = 2\pi/L_x$, L_x — период неровностей вдоль оси x, $\Omega = qs_t\eta$ — закон дисперсии рэлеевской волны, η — число, зависящее от соотношения между продольной s_l и поперечной s_t скоростями звука, η меняется в пределах 0.87–0.95 [12]; ζ — высота неровностей, ее величина равна сумме нормальных составляющих векторов деформации $\mathbf{u}^l$ и $\mathbf{u}^t$ продольной и поперечной волн на плоскости $y = 0$, т. е. $\zeta = u_y^l(0) + u_y^t(0)$.

Уравнение Шредингера, описывающее поведение электрона в поле звуковой волны, имеет вид

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}\right) = V(x,y,t)\psi. \tag{2}$$

Здесь m — эффективная масса электрона, $V(x,y,t) = \lambda_{ij}\partial u_i(x,y,t)/\partial x_j$ — потенциал, создаваемый волной, $u_i = u_i^l + u_i^t$, λ_{ij} — тензор деформации. Принимая во внимание граничные условия для вектора $\mathbf{u}$ на свободной поверхности и полагая $\lambda_{ij} = \lambda\delta_{ij}$, потенциал $V(x,y,t)$ можно выразить через параметры кристаллической решетки и высоту неровностей. В результате получим

$$V = V_0\exp(-\gamma y)\cos(qx - \Omega t), \quad V_0 = -\frac{\lambda\zeta q^2(2-\eta)}{\gamma}\frac{s_t^2}{s_l^2},$$

где $1/\gamma$ — глубина проникновения звука в полупроводник;

$$\gamma = q\left(1 - \eta^2 s_t^2/s_l^2\right)^{1/2}, \quad \left(\eta\frac{s_t}{s_l}\right)^2 \ll 1.$$

Заметим, что влияние объемного звука на электронный спектр в безграничной среде рассмотрено в работах [13–15].

Решение уравнения (2) ищем в виде суммы пространственно-временных гармоник:

$$\psi(x,y,t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty}\psi_n(x,y,t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty}\psi_n(y)\exp(i\Phi_n), \tag{3}$$

где $\Phi_n = (k_x + nq)x - (\omega + n\Omega)t$, $\hbar\omega = E$ — энергия электрона, $\hbar k_x$ — его импульс, q — положительная величина.

Подставляя выражение (3) в уравнение (2), получим

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty}\left(k_n^2 + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\psi_n(y)\exp(i\Phi_n) = -2\beta^2 q\zeta\exp(-\gamma y) \times \sum\psi_n(y)\exp(i\Phi_n)\cos(qx - \Omega t), \tag{4}$$

где

$$k_n^2 = \frac{2m}{\hbar}(\omega + n\Omega) - (k_x + nq)^2,$$

$$\beta^2 = \frac{m|V_0|}{\hbar^2\zeta q} = \frac{m\lambda^2 s_t(2-\eta)}{\hbar^2 s_l(s_l^2 - \eta^2 s_t^2)^{1/2}}.$$

Легко убедиться, что волновые функции ψ_{n-1}, ψ_n и ψ_{n+1} имеют одну и ту же зависимость от координаты x и времени t. Тогда из уравнения (4) следует, что

$$\left(k_n^2 + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\psi_n(y) = -\beta^2 q\zeta\exp(-\gamma y)\left[\psi_{n+1}(y) + \psi_{n-1}(y)\right]. \tag{5}$$

Для решения уравнения (5) воспользуемся методом последовательных приближений по малому параметру $E \gg (\hbar^2/2m)\beta^2\zeta q$ или $E \gg |V_0|$. (Поскольку мы предполагаем, что $q\zeta \ll 1$, это неравенство выполняется, например, если $m \sim 10^{-29}$ г, $\lambda \sim 10^{-12}$ эрг, $s_t^2/s_l^2 \sim 10^{-1}$, $\eta = 0.9$, а концентрация электронов $n_0 \sim 10^{16}$ см$^{-3}$. При этом $k_F = 10^6$ см$^{-1}$ и $\beta = 10^6$ см$^{-1}$.)

Решение однородного уравнения равно

$$\psi_n^0(y) = A_n \exp(ik_n y). \qquad (6)$$

Подставляя $\psi_n^0(y)$ в правую часть уравнения (5), находим решение неоднородного уравнения

$$\psi_n'(y) = -\beta^2\zeta q\left[\frac{\exp i(k_{n-1}+i\gamma)y}{k_n^2-(k_{n-1}+i\gamma)^2}A_{n-1}+\right.\\ \left.+\frac{\exp i(k_{n+1}+i\gamma)y}{k_n^2-(k_{n+1}+i\gamma)^2}A_{n+1}\right]. \qquad (7)$$

Таким образом, волновую функцию ψ можно представить в виде ряда

$$\psi_n(y) = \sum_{n=-\infty}^{\infty}\left\{A_n\exp(ik_n y)-\right.\\ -\frac{\beta^2\zeta q\exp i(k_{n-1}+i\gamma)y}{k_n^2-(k_{n-1}+i\gamma)^2}A_{n-1}-\\ \left.-\frac{\beta^2\zeta q\exp i(k_{n+1}+i\gamma)y}{k_n^2-(k_{n+1}+i\gamma)^2}A_{n+1}\right\}\exp(i\Phi_n). \qquad (8)$$

Для нахождения закона дисперсии поверхностных электронных состояний $E = E(k_x)$ необходимо воспользоваться граничными условиями для волновой функции на бесконечности и на границе раздела сред. На бесконечности волновая функция должна стремиться к нулю. Далее предполагается, что движение электронов проводимости ограничено неровной стенкой, представляющей собой бесконечно высокий потенциальный барьер. В этом случае на поверхности полупроводника в принципе возможны граничные условия двух типов [16]

$$\psi|_{y=y_0(x,t)} = 0 \quad \text{или} \quad (\mathbf{N}\nabla\psi)|_{y=y_0(x,t)} = 0, \qquad (9)$$

где $\mathbf{N}$ — вектор нормали к поверхности $y = y_0(x,t)$, направленный из вакуума в полупроводник.

Второе условие в (9) означает, что плотность потока частиц через границу равна нулю, но волновая функция на границе раздела отлична от нуля. Это обстоятельство создает предпосылки для возникновения поверхностных электронных состояний. Если неровности поверхности пологие ($q\zeta \ll 1$), то компоненты вектора нормали равны

$$N_x = -\frac{\partial y_0}{\partial x}, \quad N_y = 1, \quad N_z = 0. \qquad (10)$$

Граничное условие можно перенести с неровной поверхности на гладкую, т. е. на плоскость $y = 0$. Тогда на плоскости $y = 0$ выполняется следующее соотношение:

$$\left.\frac{\partial\psi}{\partial y} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}y_0 - \frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial y_0}{\partial x}\right|_{y=0} = 0. \qquad (11)$$

3. ДИСПЕРСИОННЫЕ УРАВНЕНИЯ ПОВЕРХНОСТНЫХ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ

Подставляя в выражение (11) волновую функцию в виде (8), получим рекуррентную формулу, описывающую соотношение между амплитудами гармоник $n-1, n, n+1$:

$$L_{n-1}A_{n-1} + L_nA_n + L_{n+1}A_{n+1} = 0, \qquad (12)$$

где

$$L_{n\mp1} = -\frac{\zeta}{2}\left\{k_{n\mp1}^2 \mp q\left[k_x + (n\mp1)q\right]\right\} -\\ -\frac{i\beta^2 q\zeta(k_{n\mp1}+i\gamma)}{k_n^2-(k_{n\mp1}+i\gamma)^2},$$

$$L_n = ik_n + \frac{\beta^2 q\zeta^2}{2}\left\{\frac{(k_n+i\gamma)^2+q\left[k_x+(n+1)q\right]}{k_{n+1}^2-(k_n+i\gamma)^2}+\right.\\ \left.+\frac{(k_n+i\gamma)^2-q\left[k_x+(n-1)q\right]}{k_{n-1}^2-(k_n+i\gamma)^2}\right\}.$$

Рассмотрим возможность существования поверхностных электронных состояний на нулевой гармонике. Для этого достаточно исследовать ее взаимодействие с гармониками $n = -1$ и $n = 1$. При этом взаимодействии амплитуда нулевой гармоники максимальна, а амплитуды гармоник $A_{-1} = A_{0-1}$ и $A_1 = A_{0+1}$ малы вследствие малости параметра $q\zeta \ll 1$. В этом приближении амплитуды гармоник с индексами $n = 2$ и $n = -2$ можно не учитывать.

Из формулы (12) получаем систему уравнений относительно величин A_{-1}, A_0 и A_1. (Заметим, что в выражении (12) $L_0 \neq L_{1-1}$ и т. д.) Приравнивая нулю определитель этой системы, находим спектр электронных состояний:

$$k_0 = -\frac{\zeta^2}{4}\left[\frac{(k_0^2+k_xq)^2}{k_{-1}} + \frac{(k_0^2-k_xq)^2}{k_1}\right] -\\ -\frac{i\beta^2 q\zeta^2}{2}\left\{\frac{k_0^2+k_xq}{k_{-1}}\left[\frac{k_0+i\gamma}{k_{-1}^2-(k_0+i\gamma)^2}+\right.\right.\\ \left.+\frac{k_{-1}+i\gamma}{k_0^2-(k_{-1}+i\gamma)^2}\right] + \frac{k_0^2-k_xq}{k_1}\times\\ \times\left[\frac{k_0+i\gamma}{k_1^2-(k_0+i\gamma)^2}+\frac{k_1+i\gamma}{k_0^2-(k_1+i\gamma)^2}\right]-\\ \left.-k_0\left(\frac{\Gamma_1}{k_1}+\frac{\Gamma_{-1}}{k_{-1}}\right)+\Gamma_0\right\}, \qquad (13)$$

где

$$\Gamma_0 = \frac{q(k_x-q)-(k_0+i\gamma)^2}{k_{-1}^2-(k_0+i\gamma)^2} - \frac{q(k_x+q)+(k_0+i\gamma)^2}{k_1^2-(k_0+i\gamma)^2},$$

$$\Gamma_{\pm 1} = \frac{(k_{\pm 1} + i\gamma) \mp k_x q}{k_0^2 - (k_{\pm 1} + i\gamma)^2}.$$

В выражениях для k_n^2 энергией кванта рэлеевского звука можно пренебречь, если $\hbar\Omega \ll \hbar^2 q^2/2m$, т. е. $2\eta s_t \ll \hbar q/m$. (Это условие хорошо выполняется, например, при $s_t \sim 10^5$ см $\cdot$ с$^{-1}$, $m \sim 10^{-29}$ г, $q \approx 2 \cdot 10^5$ см$^{-1}$ и $\Omega \approx 2 \cdot 10^{10}$ с$^{-1}$). Выбранное приближение не меняет сути физических процессов, но упрощает математические выкладки и полученные результаты применимы, когда неровности создаются стоячей звуковой волной. При $\beta \to 0$ выражение (13) переходит в формулу (7) работы [7].

Уравнение (13) решается методом последовательных приближений по малому параметру $\zeta q \ll 1$.

В первом приближении получаем $k_0^0 = 0$, т. е. нормальная составляющая импульса электрона равна нулю, и закон дисперсии электронов, движущихся вдоль абсолютно гладкой поверхности, имеет вид $E = \hbar^2 k_x^2/2m$. Область локализации скользящих вдоль поверхности электронов занимает все полупространство $(0, \infty)$.

При распространении звуковой волны скользящие электроны рассеиваются на ее потенциале V внутри объема (см. уравнение (2)), а также на неровной поверхности, создаваемой этой волной (см. уравнение (11)). В результате возбуждаются гармоники с волновыми числами k_1 и k_{-1}. Закон дисперсии электронного состояния принимает вид

$$E = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m}\left[1 + \frac{(\delta k_0)^2}{k_x^2}\right],$$

где

$$\delta k_0 = -\frac{\zeta^2 k_x^2 q^2}{4}\left(\frac{1}{k_1} + \frac{1}{k_{-1}}\right) + i\frac{\beta^2\zeta^2 q}{2} \times \\ \times \left\{(q^2 - \gamma^2)\left(\frac{1}{k_1^2 + \gamma^2} + \frac{1}{k_{-1}^2 + \gamma^2}\right) + \right. \\ \left. + 2i\gamma k_x q\left[\frac{1}{k_1(k_1^2 + \gamma^2)} - \frac{1}{k_{-1}(k_{-1}^2 + \gamma^2)}\right]\right\}. \quad (14)$$

Исследуем выражения (14) в интервале $0 < k_x \le q$. Видно, что в области $0 < k_x < q/2$ волновые числа гармоник с амплитудами A_{-1} и A_1 чисто мнимые:

$$k_{-1} = i\left[q(q - 2k_x)\right]^{1/2}, \quad k_1 = i\left[q(q + 2k_x)\right]^{1/2}. \quad (15)$$

Иными словами, волновые функции ψ_1 и ψ_{-1} локализованы вблизи поверхности. Выражение для δk_0 в этом случае является также чисто мнимым и равно

$$\delta k_0 = -\frac{(\zeta q)^2}{4}\left(\frac{1}{k_1} + \frac{1}{k_{-1}}\right)(k_x^2 - 2\beta^2), \quad (16)$$

$$\sqrt{2}\,\beta \le k_x < q/2.$$

Таким образом, возникают поверхностные электронные состояния (поверхностные электронные волны). Область их локализации равна $1/|\delta k_0|$. Она значительно превышает глубину проникновения звука.

В выражении (16) слагаемое, пропорциональное k_x^2, связано с высотой неровности поверхности, т. е. с амплитудой звука при $y = 0$. Оно, в принципе, определяет величину δk_0 также и в случае статической неровности, создаваемой, например, механической, химической или другой обработкой поверхности [9, 10]. Слагаемое, пропорциональное β^2, обусловлено рассеянием электронов на потенциале звуковой волны внутри объема полупроводника, $y \ne 0$. Этот процесс препятствует образованию поверхностных состояний. Видно, что потенциал V_0 — отрицательная величина при $\zeta > 0$.

Рассмотрим резонансный случай $k_0^0 = k_{-1}^0 = 0$, когда $k_x = q/2$.

В резонансе связь между гармониками с амплитудами A_0 и A_{-1} существенно возрастает и влиянием гармоники с $n = 1$ можно пренебречь. Тогда дисперсионное уравнение для поверхностных состояний принимает вид

$$\delta k_0 \delta k_{-1} = -\zeta^2\left(\frac{q}{4}\right)^4\left(1 - \frac{8\beta^2}{q\gamma}\right), \quad (17)$$

где

$$\delta k_0 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\delta E - q\delta k_x}, \quad \delta k_{-1} = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\delta E + q\delta k_x}.$$

Здесь δE и δk_x — вариации энергии и волнового числа, соответственно, вблизи значений $E_0 = \hbar^2/2m(q/2)^2$ и $k_x = q/2$. Равенство (17) выполняется, если δk_0 и δk_1 — равные друг другу мнимые величины, или когда они являются действительными величинами, но противоположны по знаку.

В первом случае закон дисперсии имеет вид

$$E = \frac{\hbar^2 q^2}{8m}\left[1 - \left(\frac{\zeta q}{2}\right)^2\left(1 - \frac{8\beta^2}{q\gamma}\right)\right], \quad (18)$$

$$\delta k_0 = \delta k_{-1} = i\frac{\zeta q^2}{4}\left(1 - \frac{8\beta^2}{q\gamma}\right)^{1/2}. \quad (19)$$

Во втором случае

$$E = \frac{\hbar^2 q^2}{8m}\left[1 + \left(\frac{\zeta q}{2}\right)^2\left(1 - \frac{8\beta^2}{q\gamma}\right)\right], \quad (20)$$

$$\delta k_0 = -\frac{\zeta q^2}{4}\left(1 - \frac{8\beta^2}{q\gamma}\right)^{1/2}, \quad (21)$$

$$\delta k_{-1} = -\delta k_0.$$

Таким образом, в точке $k_x = q/2$ энергия меняется скачкообразно, т. е. возникает запрещенная зона, ширина которой равна

$$2\delta E = \frac{\hbar^2 q^2}{4m}\left(\frac{\zeta q}{2}\right)^2\left(1-\frac{8\beta^2}{q\gamma}\right). \qquad (22)$$

Видно, что запрещенная зона возникает, если $q\gamma > 8\beta^2$, т. е. $\hbar^2 q^2/2m > 8\lambda s_t^2/s_l^2$.

Для образования запрещенной зоны необходимо выполнение неравенства $2\delta E \gg \hbar\nu$, где ν — характерная частота столкновений электронов. Принимая во внимание неравенство $\zeta q \ll 1$ и $\beta^2 \ll q^2$, получим условие возникновения запрещенной зоны $(2m\nu/\hbar q^2)^{1/2} < \xi q < 1$.

В резонансной области выполняется условие

$$\left|\frac{q}{2} - k_x\right| \le \frac{\zeta q^2}{4}\left(1-\frac{2\beta^2}{q\gamma}\right)^{1/2}.$$

Вне резонансной области, когда

$$\left(k_x - \frac{q}{2}\right) > \frac{\zeta q^2}{4}\left(1-\frac{2\beta^2}{q\gamma}\right)^{1/2},$$

имеем $k_{-1} = [q(2k_x - q)]^{1/2}$, $k_1 = i[q(2k_x+q)]^{1/2}$. В этом случае δk_0 и E — комплексные величины:

$$\delta k_0 = \operatorname{Re}\delta k_0 + i\operatorname{Im}\delta k_0,$$

$$\operatorname{Re}\delta k_0 = -\frac{\zeta^2 q^2}{k_{-1}}(k_x^2 + 2\beta^2),$$

$$\operatorname{Im}\delta k_0 = \frac{\zeta^2 q^2}{4|k_1|}(k_x^2 - 2\beta^2), \qquad (23)$$

$$E = \operatorname{Re}E + i\operatorname{Im}E,$$

$$\operatorname{Re}E = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m}\left[1 + \frac{(\operatorname{Re}\delta k_0)^2 - (\operatorname{Im}\delta k_0)^2}{k_x^2}\right],$$
$$\operatorname{Im}E = \frac{\hbar^2}{2m}\operatorname{Re}\delta k_0 \operatorname{Im}\delta k_0 < 0. \qquad (24)$$

Из формул (23) и (24) видно, что в коротковолновой области электронные состояния являются квазистационарными. При этом $\psi \sim \exp(-t/\tau)$, где $\tau = \hbar/|\operatorname{Im}E|$ — время релаксации; $\operatorname{Re}k_0 < 0$ в области волновых чисел

$$(k_x - q/2) \ge (\zeta q^2/4)(1 - 8\beta^2/q\gamma)^{1/2}.$$

В точке $k_x = q$ выражения (23), (24) не имеют особенностей.

Поскольку гармоника с индексом $n = -1$ резонирует с гармоникой $n = 0$, возникает необходимость исследовать поведение гармоники k_{-1} на интервале $0 < k_x < q$ при взаимодействии с ближайшими к ней гармониками $n = 0$, $n = -2$. Уравнение, описывающее это взаимодействие, имеет вид

$$k_{-1} = -\frac{\zeta^2}{4}\left\{\frac{\left[k_{-1}^2 + q(k_x - q)\right]^2}{k_2} + \frac{\left[k_{-1}^2 - q(k_x-q)\right]^2}{k_0}\right\} + \frac{i\beta^2\zeta^2 q}{2}\left(\frac{k_{-1}}{k_{-2}}F_1 + F_2 + F_3\right), \qquad (25)$$

$$F_1 = \frac{(k_{-2}+i\gamma)^2 + q(k_x - q)}{k_{-1}^2 - (k_{-2}+i\gamma)^2} - \frac{k_{-2}}{k_0}\frac{(k_0+i\gamma)^2 - q(k_x-q)}{k_{-1}^2 - (k_0+i\gamma)^2},$$

$$F_2 = \frac{(k_{-1}+i\gamma)^2 + k_x q}{k_0^2 - (k_{-1}+i\gamma)^2} - \frac{k_{-1}^2 - q(k_x-q)}{k_0}\times\left[\frac{k_{-1}+i\gamma}{k_0^2-(k_{-1}+i\gamma)^2} + \frac{k_0+i\gamma}{k_{-1}^2 - (k_0+i\gamma)^2}\right],$$

$$F_3 = \frac{(k_{-1}+i\gamma)^2 - q(k_x - 2q)}{k_0^2 - (k_{-1}+i\gamma)^2} - \frac{k_{-1}^2 + q(k_x-q)}{k_{-2}}\times\left[\frac{k_{-1}+i\gamma}{k_{-2}^2-(k_{-1}+i\gamma)^2} + \frac{k_{-2}+i\gamma}{k_{-1}^2 - (k_{-2}+i\gamma)^2}\right].$$

Его решение и закон дисперсии запишутся следующим образом:

$$k_{-1} = k_{-1}^0 + \delta k_{-1}, \quad k_{-1}^0 = 0,$$

$$\delta k_{-1} = -\frac{(\zeta q)^2}{4}(k_x - q)^2\left(\frac{1}{k_0} + \frac{1}{k_{-2}}\right) + \frac{i\zeta^2\beta^2 q}{2}\left\{(q^2-\gamma^2)\left(\frac{1}{k_0^2+\gamma^2} + \frac{1}{k_{-2}^2+\gamma^2}\right) + 2i\gamma q(k_x - q)\left[\frac{1}{k_0(k_0^2+\gamma^2)} - \frac{1}{k_{-2}(k_{-2}^2+\gamma^2)}\right]\right\}, \qquad (26)$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}(k_x-q)^2\left[1 + \frac{(\delta k_{-1})^2}{(k_x-q)^2}\right].$$

В интервале $0 \le k_x < q/2$ поверхностные электронные состояния являются квазистационарными. При этом $k_0 = [q(q-2k_x)]^{1/2}$, $k_{-2} = i[q(3q-2k_x)]^{1/2}$, т. е. δk_{-1} и E — комплексные величины:

$$\delta k_{-1} = \operatorname{Re}\delta k_{-1} + i\operatorname{Im}\delta k_{-1},$$

$$\operatorname{Re}\delta k_{-1} = -\frac{\zeta^2 q^2}{4k_0}\left[(q-k_x)^2 + 2\beta^2\right],$$
$$\operatorname{Im}\delta k_{-1} = \frac{\zeta^2 q^2}{4|k_{-2}|}\left[(q-k_x)^2 - 2\beta^2\right]. \qquad (27)$$

Из выражения (27) видно, что δk_{-1} на всем интервале $0 \le k_x < q/2$ не имеет особенностей. В точке $k_x = 0$ имеем $\operatorname{Re}\delta k_{-1} = -\zeta^2 q^3/4$, $\operatorname{Im}\delta k_{-1} = \zeta^2 q^3/4\sqrt{3}$, $E = E_1 + \delta E_1$, где $E_1 = \hbar^2 q^2/2m$, $\operatorname{Re}\delta E_1 = \hbar^2\zeta^4 q^6/48m$, $\operatorname{Im}\delta E_1 = -\hbar^2\zeta^4 q^6/16\sqrt{3}\,m$.

В резонансной точке $k_x = q/2$ мы снова получаем соотношение (17). В точке резонанса при переходе из области $(q/2 - k_x) \le (\zeta q^2/4)(1 - 8\beta^2/\gamma q)^{1/2}$ в область $(k_x - q/2) \ge (\zeta q^2/4)(1 - 8\beta^2/\gamma q)^{1/2}$ при $\operatorname{Re}\delta E > 0$ изменяются знаки у $\operatorname{Re} k_0$ и $\operatorname{Re} k_{-1}$.

При дальнейшем увеличении k_x, т. е. в области $q/2 < k_x < q$ возникают «чистые» поверхностные электронные состояния. При этом

$$k_0 = i\left[q(2k_x - q)\right]^{1/2}, \quad k_{-2} = i\left[q(3q - 2k_x)\right]^{1/2},$$

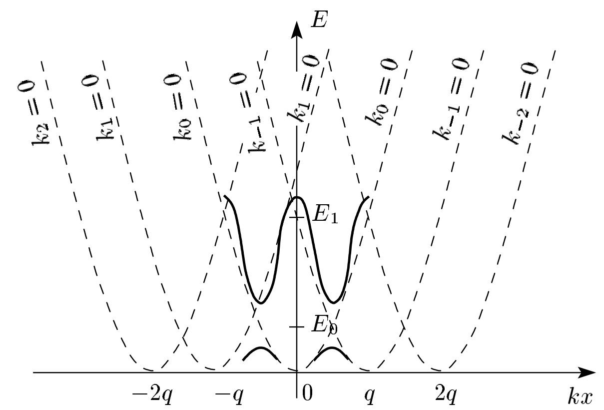
$$\delta k_{-1} = \frac{i\zeta^2 q^2}{4}\left(\frac{1}{|k_0|} + \frac{1}{|k_{-2}|}\right)\left[(q - k_x)^2 - 2\beta^2\right], \quad (28)$$

$$q - k_x \ge \sqrt{2}\,\beta.$$

Аналогичным образом ведут себя при взаимодействии гармоники с $n = -1, 0, 1$ и с $n = 0, 1, 2$ в области $k_x < 0$.

Изложенные выше результаты отражены на рисунке. На нем приведены дисперсионные кривые, описывающие зависимость энергии электрона от тангенциальной составляющей k_x волнового вектора для гармоник с $n = 0$ и $n = -1$.

Штриховые кривые $k_0^0 = 0$, $k_{-1}^0 = 0$ представляют закон дисперсии скользящих электронов. Для них нормальная компонента волнового вектора равна нулю в случае гладкой поверхности, т. е. при равном нулю потенциале. Все гармоники распространяются независимо друг от друга. Под действием потенциала поля звуковой волны эти гармоники оказываются связанными друг с другом. В результате дисперсионные кривые $E = E(k_x)$, представленные сплошными линиями, смещаются относительно $k_0^0 = 0$ и $k_{-1}^0 = 0$.



Закон дисперсии поверхностных электронов

Кривая $E = E(k_x)$ для нулевой гармоники в области $k_{0cr} \le k_x \le q/2$ проходит ниже линии $k_0^0 = 0$, поскольку δk_0 — мнимая величина. Ее начало находится в точке $k_x = k_{0cr}$, $k_{0cr} = \sqrt{2}\,\beta$, $E = \hbar^2 k_{0cr}^2/2m$. В области $q/2 \le k_x \le q$ величина δk_0 оказывается комплексной, причем $(-\operatorname{Re}\delta k_0) > \operatorname{Im}\delta k_0$ и $E = E(k_x)$ проходит выше $k_0^0 = 0$.

Если же в системе возбуждена гармоника с $n = -1$, то ее дисперсионная кривая $E = E(k_x)$ оказывается выше линии $k_{-1}^0 = 0$ в области $0 \le k_x \le q/2$, где δk_{-1} — комплексная величина, и ниже $k_{-1}^0 = 0$ в области $q/2 \le k_x \le k_{-1cr}$ (δk_{-1} — мнимая величина). Спектр заканчивается в точке $k_x = k_{-1cr}$, $k_{-1cr} = q - \sqrt{2}\,\beta$, $E = \hbar^2 k_{-1cr}^2/2m$.

Дисперсионные кривые выглядят аналогично в области отрицательных значений k_x.

В связи с тем, что параметр β играет негативную роль в образовании поверхностных электронных состояний, желательно найти способ от него избавиться. Иными словами, необходимо создать такие условия, при которых электроны проводимости не попадают в поле потенциала звуковой волны. С этой точки зрения, заслуживает внимания структура, состоящая из полупроводника и диэлектрика, которые пространственно разделены вакуумным промежутком, имеющим потенциальный барьер высотой U и шириной a.

Пусть полупроводник занимает область пространства $y \ge a$, вакуум и диэлектрик соответственно $0 \le y \le a$, $y < 0$.

Если рэлеевская волна распространяется в диэлектрике, то на его поверхности образуются неровности высотой ζ. Тогда в случае отсутствия акустического контакта диэлектрика с полупроводником ($a \gg \zeta$) волновая функция в полупроводнике описывается выражениями (3) и (6). В области $0 \le y \le a$ n-гармоника волновой функции находится из уравнения

$$\frac{\partial^2\psi_n(y)}{\partial y^2} + \kappa_n^2\psi_n(y) = 0,$$
$$\kappa_n^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - U) - (k_x + nq)^2. \quad (29)$$

На границе $y = a$ непрерывны волновые функции и производные $\partial\psi/\partial y$, а на границе $y = 0$ выполняется условие (11).

В результате несложных вычислений получим следующий закон дисперсии поверхностных электронных состояний для гармоники с $n = 0$ при ее взаимодействии с гармониками, для которых $n = -1$ и $n = 1$:

$$k_0 = -\frac{\zeta^2}{4}\left\{\frac{(\kappa_0^2 + k_x q)\left[\kappa_{-1}^2 - q(k_x - q)\right]}{k_{-1}} + \right.$$
$$\left. + \frac{(\kappa_0^2 - k_x q)\left[\kappa_1^2 + q(k_x + q)\right]}{k_1}\right\}. \quad (30)$$

Полагая, что $\zeta \to 0$, а энергия электрона меньше U, находим

$$k_0^0 = 0, \quad E = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m},$$
$$\delta k_0 = -\frac{\zeta^2}{4}\left(\frac{2mU}{\hbar^2}\right)^2\left(\frac{1}{k_{-1}} + \frac{1}{k_1}\right), \quad (31)$$

где $k_{\pm 1}^2 = -q(q \pm 2k_x)$, $|\delta k_0| a \ll 1$.

Отсюда следует, что в структуре диэлектрик–вакуум–полупроводник область существования поверхностных электронных состояний значительно расширяется. Спектр начинается со значений $k_x = 0$. При этом

$$\delta k_0 = \frac{i\zeta^2}{2q}\left(\frac{2mU}{\hbar}\right)^2, \quad E = \frac{\hbar^2 \delta k_0^2}{2m}.$$

Ширина запрещенной зоны возрастает (см. (22)):

$$2\delta E = \frac{\hbar^2\zeta^2}{m}\left(\frac{2mU}{\hbar^2}\right)^2.$$

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе показана возможность возникновения поверхностных электронных состояний (электронных волн) на границе раздела вакуум–полупроводник при распространении рэлеевской звуковой волны. Размер их области локализации значительно превышает глубину проникновения рэлеевской волны. Найдены законы дисперсии и построены кривые, определяющие зависимость энергии электрона от тангенциальной составляющей его импульса. Обнаружено существование двух характерных областей поверхностных состояний, разделенных запрещенной зоной. При малых энергиях (ниже запрещенной зоны) происходит «захват» электронов проводимости неровностями границы и возникают «чистые» поверхностные состояния. Эффекты носят пороговый характер.

При больших энергиях (выше запрещенной зоны) образуются квазистационарные состояния с конечным временем жизни.

Исследован закон дисперсии в структуре диэлектрик–вакуум–полупроводник в условиях, когда рэлеевский звук распространяется в диэлектрике. В этом случае область существования поверхностных электронных состояний расширяется и увеличивается ширина запрещенной зоны.

Существование поверхностных электронных состояний может привести к интересным особенностям в электромагнитных свойствах кристаллов. Например, к зависимости концентрации электронов от координаты y, что приводит к изменению коэффициентов отражения электромагнитных волн от границы раздела сред, к изменению закона дисперсии плазменных колебаний и т. д. [11].

ЛИТЕРАТУРА

1. И. Е. Тамм, ЖЭТФ **3**, 34 (1933).
2. W. Shockly, Phys. Rev. **56**, 317 (1939).
3. И. М. Лифшиц, С. И. Пекар, УФН **56**, 531 (1955).
4. R. Fucks and K. Kliwer, Phys. Rev. A **140**, 2076 (1965).
5. В. М. Агранович, Б. П. Антонюк, А. Г. Мальшуков, Письма в ЖЭТФ **23**, 492 (1976).
6. В. М. Агранович, Б. П. Антонюк, Е. П. Иванова, А. Г. Мальшуков, ЖЭТФ **72**, 614 (1977).
7. Ф. Бехштедт, Р. Эйдерлайн, *Поверхности и границы раздела полупроводников*, Мир, Москва (1990), с. 488.
8. М. В. Буртыка, В. М. Яковенко, И. В. Яковенко, ФНТ **21**, 628 (1995).
9. V. A. Pogrebnyak, V. M. Yakovenko, and I. V. Yakovenko, Phys. Lett. A **209**, 103 (1995).
10. В. А. Погребняк, В. М. Яковенко, И. В. Яковенко, ФТТ **39**, 1975 (1997).
11. С. И. Ханкина, В. М. Яковенко, И. В. Яковенко, Изв. вузов. Радиофизика **16**, 887 (2002).
12. Л. Д. Ландау, И. М. Лифшиц, *Теория упругости*, Наука, Москва (1965), с. 203.
13. E. M. Ganapolskii, Semicond. Sci. Technol. **10**, 1707 (1995).
14. Л. В. Келдыш, ФТТ **4**, 2265 (1962).
15. Б. Г. Лайхтман, Ю. В. Погорельский, ФТТ **14**, 2765 (1972).
16. A. O. Animaly, Phil. Mag. **21**, 137 (1970).