Low Temperature Physics/Физика низких температур, 2011, т. 37, № 11, с. 1148–1155

Электронные состояния на неровной поверхности твердого тела

С.И. Ханкина, В.М. Яковенко

Институт радиофизики и электроники им. А.Я. Усикова НАН Украины
ул. Ак. Проскуры, 12, г. Харьков, 61085, Украина
E-mail: yakovenko@ire.kharkov.ua

И.В. Яковенко

Научно-исследовательский и проектно-конструкторский институт «Молния» Министерства образования и науки Украины, ул. Шевченко, 47, г. Харьков, 61013, Украина

Статья поступила в редакцию 11 марта 2011 г.

Получены и исследованы поверхностные электронные состояния на периодически неровной границе твердого тела. Показано, что существуют две области в спектре поверхностных состояний, разделенных запрещенной зоной. Свойства поверхностных состояний в этих областях существенно различаются. Показано, что под действием поверхностных электронных состояний образуется приповерхностный неоднородный плазменный слой, что приводит к особенностям распространения поляритонов и к пространственной дисперсии частоты электростатических колебаний. Найдены соответствующие дисперсионные соотношения. Рассмотрены особенности образования электронных состояний в случае, когда периодический изгиб поверхности среды обусловлен распространением рэлеевского звука.

Отримано та досліджено поверхневі електронні стани на періодично нерівній межі твердого тіла. Показано, що існують дві області в спектрі поверхневих станів, які розділені забороненою зоною. Властивості поверхневих станів в цих областях істотно розрізняються. Показано, що під дією поверхневих електронних станів утворюється приповерхневий неоднорідний плазмовий шар, що призводить до особливостей поширення поляритонів та до просторової дисперсії частоти електростатичних коливань. Знайдено відповідні дисперсійні співвідношення. Розглянуто особливості утворення електронних станів у випадку, коли періодичний вигин поверхні середовища, обумовлено поширенням релеївського звуку.

PACS: **73.20.–r** Электронные состояния на поверхностях и границах раздела;
73.21.–b Электронные состояния и коллективные возбуждения в многослойных структурах, квантовые ямы, мезоскопические и наномасштабные системы.

Ключевые слова: периодические неровности, рэлеевский звук, электронные состояния, неоднородная плазма, поляритоны.

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 проводящих сред, в частности механизмов возникновения поверхностных электронных состояний. Возможность существования поверхностных электронных состояний в ограниченных кристаллах впервые была показана еще в 1932 г. И. Таммом [1]. Позже (1939г.) 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 и А.Г. Мальшуков исследовали процессы локализации электронно-дырочных пар (экситонов), обусловленных изгибными колебаниями поверхности [5]. Авторы [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, посвященных теоретическому и экспериментальному исследованию свойств поверхности и границ раздела полупроводников, изложен в книге [7].

Нами в работах [8–10] определены поверхностные электронные состояния на границе полупроводник–вакуум в присутствии либо δ-образного потенциала, либо регулярных или случайных шероховатостей на границе сред. При этом поверхностные электронные состояния приводят к образованию неоднородного приграничного плазменного слоя и к существенному изменению закона дисперсии поверхностных электромагнитных колебаний [11,12].

В настоящем сообщении показана возможность появления поверхностных электронных состояний (волн), обусловленных наличием одномерных пологих периодических неровностей [9]. Исследовано появление электронных состояний, когда неровности границы созданы рэлеевской звуковой волной [13].

1. Электронные состояния на периодически неровной границе раздела сред

Рассмотрим электронные состояния в твердотельной проводящей среде, занимающей полупространство $y > y_0(x)$, ограниченное потенциальным барьером $U(x,y)$ [9]:

$$\begin{array}{ll} U(x,y)=\infty & y \le y_0(x) \\ U(x,y)=0 & y > y_0(x) \end{array}, \qquad (1)$$

где $y_0(x)$ — функция, описывающая форму границы раздела сред. Ограничимся рассмотрением непроницаемой границы (бесконечно высокий потенциальный барьер), неровности которой зависят от одной координаты x. Система однородна вдоль оси z. Собственные волновые функции $\psi(x,y)$ и собственные значения энергии электрона E определяются из стационарного уравнения Шредингера

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}\left[E - U(x,y)\right]\psi = 0 \qquad (2)$$

$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}$$

и граничных условий на поверхности $y = y_0(x)$ и на бесконечности.

Волновая функция должна быть ограничена при $x, y \to \infty$, а на поверхности $y = y_0(x)$ граничные условия могут быть двух типов [14]:

$$\psi\big|_{y=y_0(x)} = 0, \qquad (3)$$

$$\mathbf{N}\nabla\psi\big|_{y=y_0(x)} = 0, \qquad (4)$$

где $\nabla = \bar{i}\,\frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{j}\frac{\partial}{\partial y}$, $\mathbf{N}$ — вектор нормали к поверхности с компонентами

$$N_x = -\frac{\dfrac{\partial y_0}{\partial x}}{\left[1+\left(\dfrac{\partial y_0}{\partial x}\right)^2\right]^{1/2}}, \quad N_y = \frac{1}{\left[1+\left(\dfrac{\partial y_0}{\partial x}\right)^2\right]^{1/2}}. \qquad (5)$$

Условие (3) означает, что плотность частиц и плотность их потока равны нулю на границе; условие (4) — на границе раздела равен нулю только поток плотности частиц, а волновая функция отлична от нуля. Условие (4) создает предпосылку для возникновения поверхностных электронных состояний, поэтому в дальнейшем именно им и будем пользоваться.

Рассмотрим одномерные периодические неровности, когда $y_0(x) = \xi_0 \cos(Gx)$, где ξ_0 — высота неровности, $L = (2\pi / G)$ — пространственный период неровностей вдоль оси x. В этом случае волновая функция $\psi(x,y)$, описывающая поведение частицы в области $y > y_0(x)$, может быть представлена следующим образом:

$$\psi(x,y) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} A_n \exp\left[i(k_x + nG)x + ik_{yn}y\right], \qquad (6)$$

n — номер гармоники (n — целое число), A_n — ее амплитуда, k_x, k_y — составляющие волнового вектора электрона.

Задача состоит в том, чтобы найти дисперсионное уравнение, связывающее тангенциальную составляющую вектора k_x с энергией электрона E.

Из уравнения Шредингера следует соотношение между E и $\mathbf{k}$

$$k_n^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} - (k_x + Gn)^2. \qquad (7)$$

(Здесь и далее у k_n опущен индекс y.)

Для решения уравнения Шредингера с граничным условием (4) воспользуемся теорией возмущений, считая, что амплитуда неровностей мала по сравнению с ее периодом, $\xi_0 G << 1$, т.е. неровности пологие. Компоненты вектора нормали равны

$$N_x = -\frac{\partial y_0(x)}{\partial x}, \quad N_y = 1\,. \qquad (8)$$

Граничные условия (4) можно перенести с неровной поверхности на гладкую, т.е. на плоскость $y=0$. Тогда на плоскости $y=0$ выполняется следующее соотношение:

$$\left.\frac{\partial\psi}{\partial y}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}y_0-\frac{\partial\psi}{\partial x}\frac{\partial y_0}{\partial x}\right|_{y=0}=0. \quad (9)$$

Подставим в выражение (9) волновую функцию электрона вида (6) и ограничимся приближением первых гармоник A_0, A_1, A_{-1}, пренебрегая гармониками с $n\geq 2$, так как их связь с нулевой гармоникой пропорциональна $(\xi_0 G)^n$.

В этом случае дисперсионное соотношение имеет вид

$$k_0=-\frac{1}{4}\xi_0^2\left\{\frac{(k_0^2+Gk_x)^2}{k_{-1}}+\frac{(k_0^2-Gk_x)^2}{k_1}\right\}. \quad (10)$$

Решение (10) находим методом последовательных приближений по малому параметру $\xi_0 G$.

В первом приближении при $\xi_0=0$ (поверхность гладкая) существует решение, у которого

$$k_0^{(0)}=0, \quad (11)$$

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 $(0,\infty)$.

В следующем приближении получим

$$\delta k_0=-\frac{1}{4}(\xi_0 k_x G)^2\left(\frac{1}{k_1}+\frac{1}{k_{-1}}\right). \quad (12)$$

Исследуем выражение (12) в интервале $0<k_x\leq G$. Видно, что в области $0<k_x<G/2$ волновые числа гармоник с амплитудами A_{-1} и A_1 чисто мнимые: $k_{-1}=i\left[G(G-2k_x)\right]^{1/2}$; $k_1=i\left[G(G+2k_x)\right]^{1/2}$; и выражение для δk_0 является чисто мнимым.

В длинноволновом приближении, когда $k_x \ll G$, из уравнения (12) получим

$$\delta k_0=\frac{i}{2}(\xi_0 k_x)^2 G; \quad k_1=k_{-1}=iG. \quad (13)$$

Это решение определяет локализованные вблизи поверхности электронные волны — электронные состояния с энергией

$$E=\frac{\hbar^2}{2m}\left[k_x^2\left(1-\frac{1}{4}\xi_0^4 G^2 k_x^2\right)\right]. \quad (14)$$

Волновая функция поверхностных электронных состояний имеет вид

$$\psi=A_0\exp\left[ik_x x-\delta k_0 y\right]. \quad (15)$$

Длина пространственной локализации волновой функции электрона $R=1/\delta k_0$ уменьшается с увеличением волнового вектора k_x.

Наиболее эффективно периодические неоднородности поверхности влияют на электронные состояния в условиях резонанса, когда совпадают волновые векторы соседних гармоник, например, когда $k_0=k_{-1}$. В этом случае $k_x=G/2$. Влиянием гармоники с $n=1$ можно пренебречь. Тогда дисперсионное уравнение для поверхностных состояний принимает вид

$$\delta k_0\delta k_{-1}=-\xi_0^2\left(\frac{G}{4}\right)^4, \quad (16)$$

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

Здесь δE и δk_x — вариации энергии и волнового числа соответственно вблизи значений $E_0=\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{G}{2}\right)^2$ и $k_x=G/2$. Равенство (16) выполняется, если δk_0 и δk_1 — мнимые величины, равные друг другу, или когда они являются действительными величинами, но противоположны по знаку.

В первом случае закон дисперсии имеет вид

$$E=\frac{\hbar^2 G^2}{8m}\left[1-\left(\frac{\xi_0 G}{2}\right)^2\right], \quad (17)$$

$$\delta k_0=\delta k_{-1}=i\frac{\xi_0 G^2}{4}. \quad (18)$$

Во втором случае

$$E=\frac{\hbar^2 G^2}{8m}\left[1+\left(\frac{\xi_0 G}{2}\right)^2\right], \quad (19)$$

$$\delta k_0=-\frac{\xi_0 G^2}{4}, \quad (20)$$

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

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

$$2\delta E=\frac{\hbar^2 G^2}{4m}\left(\frac{\xi_0 G}{2}\right)^2. \quad (21)$$

Для образования запрещенной зоны необходимо выполнение неравенства $2\delta E \gg \hbar\nu$, где ν — характерная частота столкновения электронов.

В резонансной области выполняется условие $\left|\frac{G}{2}-k_x\right| \le \frac{\xi_0 G^2}{4}$. Вне резонансной области, когда $\left(k_x-\frac{G}{2}\right) > \frac{\xi_0 G^2}{4}$, имеем $k_{-1}=\left[G(2k_x-G)\right]^{1/2}$, $k_1 = i\left[G(G+2k_x)\right]^{1/2}$. В этом случае δk_0 и E — комплексные величины.

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

$$\mathrm{Re}\,\delta k_0 = -\frac{\xi_0^2 G^2}{k_{-1}} k_x^2,$$

$$\mathrm{Im}\,\delta k_0 = \frac{\xi_0^2 G^2}{4|k_1|} k_x^2. \qquad (22)$$

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

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

$$\mathrm{Im}\,E = \frac{\hbar^2}{2m}\mathrm{Re}\,\delta k_0\,\mathrm{Im}\,\delta k_0 < 0. \qquad (23)$$

Из (22) и (23) видно, что в коротковолновой области электронные состояния являются квазистационарными. При этом $\psi \sim \exp(-t/\tau)$, где $\tau = \frac{\hbar}{|\mathrm{Im}\,E|}$ — время релаксации. $\mathrm{Re}\,k_0 < 0$ в области волновых чисел $\left(k_x-\frac{G}{2}\right) \ge \frac{\xi_0 G^2}{4}$.

Таким образом, запрещенная зона разделяет электронный спектр на две области: область чистых поверхностных электронных состояний и квазистационарных (псевдоповерхностных состояний, имеющих конечное время жизни).

2. Поверхностные поляритоны (плазмоны) на неровной границе полупроводник–диэлектрик

Волновая функция поверхностных электронных состояний, возникающих на неровностях границы, имеет вид

$$\psi_{k_0} = A_0 \exp\left[-|\delta k_0|\,y + i(k_x x - \omega_k t)\right]. \qquad (24)$$

Величина амплитуды A_0 определяется из условия нормировки

$$\iiint \psi_{k_0}\psi^*_{k_0}\,dxdydz = 1.$$

В результате получим, что $A_0 = \sqrt{2|\delta k_0|/S}$, где $S = L_x L_z$, L_x и L_z — размеры образца в направлениях x и z соответственно.

Зависимость волновой функции поверхностных электронных состояний от координаты y приводит к возникновению неоднородной плазмы в области $y > y_0$. Выразим ее основные параметры через высоту и период неровной поверхности. Концентрацию электронов $\delta n_0(y)$ определим следующим образом:

$$\delta n_0(y) = \sum_{k_x}\psi_{k_0}\psi^*_{k_0} n_k = \frac{2}{S}\sum_{k_x} n_{k_x}|\delta k_0|\exp\left[-2|\delta k_0|\,y\right], \qquad (25)$$

где n_{k_x} — число электронов с волновым числом k_x; суммирование ведется по всем значениям k_x. При этом минимальное значение k_x определяется размерами образца в направлении x, т.е. величиной L_x, а максимальные — ферми-импульсом $\hbar k_F$. Полное число частиц в области $y > 0$ равно $\sum_{k_x} n_{k_x}$, а поверхностная плотность $n_s = \sum_{k_x} n_{k_x}/S = \int_0^\infty \delta n_0(y)\,dy$.

Приведем значения $\delta n_0(0)$ и n_s для вырожденного электронного газа при $n_{\mathbf{k}} = 0$ и $n_{\mathbf{k}} = 1$.

Если $k_F \ll G/2$, то

$$n_s = k_F^2/(4\pi), \quad \delta n_0(0) = \varsigma^2 k_F^2 G n_s/4. \qquad (26)$$

При $k_F \gg G/2$

$$n_s = k_F G/(2\pi^2), \quad \delta n_0(0) = \varsigma^2 G^3 n_s/12. \qquad (27)$$

Определим спектр поверхностных электромагнитных колебаний на неровной границе диэлектрик–полупроводник. Система уравнений, описывающая электромагнитные колебания в полупроводниковой плазме $(y > 0)$, имеет вид

$$\mathrm{rot}\,\mathbf{E}_1 = -\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{H}_1}{\partial t}, \quad \mathrm{rot}\,\mathbf{H}_1 = \frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{D}_1}{\partial t} + \frac{4\pi}{c}\mathbf{j},$$

$$\mathrm{div}\,\mathbf{D}_1 = 4\pi e n(\mathbf{r},t), \quad e\frac{\partial n}{\partial t} + \mathrm{div}\,\mathbf{j} = 0, \qquad (28)$$

где

$$\mathbf{D}_1(\mathbf{r},t) = \int_{-\infty}^{t}\hat{\varepsilon}_0(t-t')\,\mathbf{E}_1(\mathbf{r},t')\,dt'. \qquad (29)$$

Выражение (29) описывает электромагнитные свойства среды в отсутствие пространственной дисперсии диэлектрической проницаемости. В этом случае фурье-образ диэлектрической проницаемости имеет вид

$$\varepsilon_0(\omega) = \int_0^\infty \hat{\varepsilon}_0(\tau)\exp(i\omega\tau)\,d\tau.$$

В уравнениях (28) $n(\mathbf{r},t)$ — отклонение концентрации электронов от равновесного значения $\delta n_0(y)$, $\mathbf{j}$ — ток, который в отсутствие пространственной дисперсии среды выражается через векторный потенциал $\mathbf{A}$ следующим образом:

$$\mathbf{j} = -\frac{e^2\delta n_0(y)}{mc}\mathbf{A}(\mathbf{r},t). \tag{30}$$

(Калибровка выбрана таким образом, что потенциал $\phi = 0$ и $\mathbf{E} = -c^{-1}\partial\mathbf{A}/\partial t$.)

В диэлектрике $(y<0)$

$$\mathrm{rot}\,\mathbf{E}_2 = -\frac{1}{c}\frac{\partial \mathbf{H}_2}{\partial t},\ \ \mathrm{rot}\,\mathbf{H}_2 = \frac{\varepsilon_2}{c}\frac{\partial \mathbf{E}_2}{\partial t}. \tag{31}$$

Заметим, что между диэлектриком и полупроводниковой плазмой имеется малый промежуток, так что акустический контакт между диэлектриком и полупроводником отсутствует. Предположим, что длина электромагнитной волны превосходит высоту и период неровностей поверхности. В этом случае граничные условия для электромагнитных полей такие же, как и на гладкой поверхности, т.е. на плоскости $y=0$ непрерывны тангенциальные составляющие электрического и магнитного полей.

Зависимость векторного потенциала, как и всех переменных величин в уравнениях (28)–(30), от координаты времени зададим в виде $\mathbf{A}(\mathbf{r},t) = \mathbf{A}(y)\exp\left[i(q_x x - \omega t)\right]$, где q_x и ω — волновое число и частота электромагнитного поля соответственно. Вектор $\mathbf{A}$ имеет компоненты A_x и A_y, а у магнитного поля есть только компонента H_z. Относительно компоненты H_{z1} система уравнений (28) сводится к уравнению

$$\left[\frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon_1(y) - q_x^2\right]H_{z1} + \varepsilon_1(y)\frac{\partial}{\partial y}\left[\frac{1}{\varepsilon_1(y)}\frac{\partial H_{z1}}{\partial y}\right] = 0, \tag{32}$$

где $\varepsilon_1(y) = \varepsilon_0(\omega) - \tilde{\omega}_0^2(y)/\omega^2$, $\tilde{\omega}_0^2(y) = 4\pi e^2\delta n_0(y)/m$.

Решение уравнения (32) ищем в виде

$$H_{z1}(y) = C_1\exp\left[-\int_0^y q(y')dy'\right]. \tag{33}$$

Для определения $q(y)$ получим из (32) уравнение

$$q^2 + \frac{1}{\varepsilon_1(y)}\frac{\partial\varepsilon_1(y)}{\partial y}q + \frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon_1(y) - q_x^2 = 0, \tag{34}$$

которое справедливо при выполнении условия $q^{-1}dq/dy \ll q$. Это условие означает, что относительное изменение глубины проникновения волны в среду $y>0$ мало на расстояниях порядка $1/q$. Из двух решений уравнения (34) выбираем то, которое удовлетворяет условию убывания электромагнитного поля при $y\to\infty$:

$$q_1 = -\frac{1}{2\varepsilon_1(y)}\frac{\partial\varepsilon_1(y)}{\partial y} + \sqrt{q_x^2 - \frac{\omega^2}{c^2}\varepsilon_1(y)}. \tag{35}$$

Здесь $q_x^2 > \omega^2\varepsilon_1(y)/c^2$ и $q_x^2 - \omega^2\varepsilon_1(y)/c^2 > [\varepsilon_1^{-1}(y)/\partial\varepsilon_1(y)/\partial y]^2$. Второе неравенство означает, что глубина проникновения электромагнитного поля в плазму меньше масштаба области локализации волновой функции электрона, т.е. $q_1 \sim q_x \gg |\delta k_0|_{\max}$, где $|\delta k_0|_{\max} = \xi_0^2 G^3/8$. Видно, что это условие легко выполняется.

Компоненты электрического поля в плазме выражаются через компоненту H_{z1} следующим образом:

$$E_{x1} = -i\frac{q_1 c}{\omega\varepsilon_1(y)}H_{z1},\ \ E_{y1} = \frac{q_x c}{\omega\varepsilon_1}H_{z1}; \tag{36}$$

в диэлектрике

$$H_{z2} = C_2\exp(q_2 y);\ \ E_{x2} = i\frac{q_2 c}{\omega\varepsilon_2}H_{z2};\ \ E_{y2} = \frac{q_x c}{\omega\varepsilon_2}H_{z2}, \tag{37}$$

где $q_2 = \sqrt{q_x^2 - \omega^2\varepsilon_2/c^2} > 0$.

Из граничных условий на плоскости $y=0$ следует

$$q_1(0) = -q_2\frac{\varepsilon_1(0)}{\varepsilon_2}. \tag{38}$$

Это равенство выполняется, если $\varepsilon_1(0) < 0$. Подставляя в (38) значения q_1 и q_2, получаем дисперсионное уравнение для поперечных поверхностных электромагнитных волн (поверхностных поляритонов)

$$q_x^2 = \frac{\omega^2}{c^2}\frac{\varepsilon_1(0)\varepsilon_2}{\varepsilon_1(0)+\varepsilon_2} - \frac{\varepsilon_1'(0)\varepsilon_2^2\left[q_x^2 - \omega^2\varepsilon_1(0)/c^2\right]^{1/2}}{\varepsilon_1(0)\left[\varepsilon_1^2(0) - \varepsilon_2^2\right]}, \tag{39}$$

где $\varepsilon_1'(0) = -\frac{4\pi e^2}{m\omega^2}\frac{\partial\delta n_0(y)}{\partial y}\bigg|_{y=0}$.

Уравнение (39) решаем относительно q_x методом последовательных приближений по малому параметру $[\varepsilon_1'(0)/q_x\varepsilon_1(0)] \ll 1$. В результате получим

$$q_x = q_{x0} + \delta q_x;\qquad q_{x0}^2 = \frac{\omega^2}{c^2}\frac{\varepsilon_1(0)\varepsilon_2}{\varepsilon_1(0)+\varepsilon_2};$$

$$\delta q_x = \frac{\varepsilon_1'(0)\varepsilon_2^{3/2}}{2|\varepsilon_1(0)|^{1/2}\left[\varepsilon_1^2(0) - \varepsilon_2^2\right]}. \tag{40}$$

Величина δq_x положительна, так как значение $\varepsilon_1'(0)$ всегда положительно $(|\varepsilon_1(0) > \varepsilon_2|)$. Действительно, $\varepsilon_1'(0) = 16\pi e^2/(m\omega^2 S)\sum_{k_x} n_{k_x}|\delta k_0|^2 > 0$ и при $k_F \ll G/2$ имеем $\varepsilon_1'(0) = [e^2/(m\omega^2)]\varsigma^4 G^4 k_F^2/16$.

Таким образом, наличие поверхностных электронных состояний приводит к возникновению поверхностных поляритонов, закон дисперсии которых иной, чем в случае распространия вдоль гладкой поверхности однородной плазмы. В частности, фазовая скорость поляритона уменьшается.

Для электростатических колебаний $(c \to \infty)$ из (39) следует соотношение

$$\varepsilon_1(0) + \varepsilon_2 = -\frac{\varepsilon_1'(0)\varepsilon_2^2}{\varepsilon_1(0)(\varepsilon_1(0) - \varepsilon_2)q_x}. \tag{41}$$

В этом случае $\omega = \omega' + \delta\omega$. Если $\varepsilon_0(\omega) = \varepsilon_0 - \omega_0^2/\omega^2$, частоты ω' и $\delta\omega$ определяются выражениями

$$\omega'^2 = \frac{\omega_0^2 + \tilde{\omega}_0^2}{\varepsilon_0 + \varepsilon_2}, \quad \delta\omega = -\frac{\omega'\varepsilon_1'(0)}{4q_x}, \tag{42}$$

где ω_0 — ленгмюровская частота однородной плазмы.

Если глубина проникновения электромагнитной волны больше области локализации волновой функции электронов $(|q_x| << |\delta k_0|)$, то на поверхности раздела сред образуется двумерный электронный газ. Можно показать, что дисперсионное уравнение поверхностных электростатических колебаний в этом случае имеет вид

$$\varepsilon_0(\omega) + \varepsilon_2 = \frac{\omega_{0s}^2}{\omega^2}|q_x|; \quad \omega_{0s}^2 = \frac{4\pi e^2 n_s}{m}. \tag{43}$$

Таким образом, на границе твердого тела с неровностями возникает неоднородная плазма. Ее параметры определяются свойствами поверхности. На границе такой плазмы с диэлектриком в области частот, меньших легмюровской, распространяются поверхностные электромагнитные волны, фазовая скорость которых зависит от величины электронной концентрации на границе раздела сред. Неоднородность плазмы приводит к дисперсии частоты в условиях пренебрежения запаздыванием. Групповая скорость такой волны положительна, а ее величина определяется характером убывания электронной концентрации от границы.

Возбуждение такого рода поверхностных поляритонов может дать важную информацию об электронных состояниях на неровной границе.

3. Поверхностные электронные состояния, создаваемые рэлеевской волной

Исследуем особенности электронных поверхностных состояний на периодических неровностях границы, создаваемых рэлеевской звуковой волной, в поле которой находятся электроны проводимости. Заметим, что влияние объемного звука на электронный спектр в безграничной среде рассмотрено в работах [15–17].

Пусть вдоль поверхности $y = y_0(x,t)$ в направлении оси x распространяется звуковая (рэлеевская) волна с частотой Ω и волновым вектором G. Как и в разд. 1, 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:

$$y_0(x,t) = \xi_0 \cos(Gx - \Omega t), \tag{44}$$

где $\Omega = Gs_t\eta$ — 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 [18]; величина высоты неровностей ξ_0 равна сумме нормальных составляющих векторов деформации $\mathbf{u}^l$ и $\mathbf{u}^t$ продольной и поперечной волн на плоскости $y = 0$, т.е. $\xi_0 = u_y^l(0) + u_y^t(0)$.

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

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}\right) = V(x,y,t)\psi. \tag{45}$$

Здесь $V(x,y,t) = \lambda_{ij}\dfrac{\partial u_i(x,y,t)}{\partial x_j}$ — 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

$$V = V_0 \exp(-\gamma y)\cos(Gx - \Omega t); \quad V_0 = -\frac{\lambda\xi_0 G^2(2-\eta)}{\gamma}\frac{s_t^2}{s_l^2},$$

где $\dfrac{1}{\gamma}$ — глубина проникновения звука в полупроводник; $\gamma = G\left(1 - \eta^2\dfrac{s_t^2}{s_l^2}\right)^{1/2}$; $\left(\eta\dfrac{s_t}{s_l}\right)^2 << 1$. Таким образом, в случае изгиба поверхности под действием рэлеевского звука появляются дополнительные по сравнению с разд. 1 параметры: Ω — частота звука, $1/\gamma$ — область его локализации, V — потенциал, создаваемый звуком.

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

$$\psi(x,y,t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty}\psi_n(x,y,t) = \sum_{n=-\infty}^{\infty}\psi_n(y)\exp(i\Phi_n), \tag{46}$$

где $\Phi_n = (k_x + nq)x - (\omega + n\Omega)t$; G — положительная величина.

Подставляя выражение (46) в уравнение (45), получаем

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty}\left(k_n^2 + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\psi_n(i\Phi_n)\exp(i\Phi_n) =$$
$$= -2\beta^2 G\xi_0 \exp(-\gamma y)\sum\psi_n(y)\exp(i\Phi_n)\cos(Gx - \Omega t), \tag{47}$$

где

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

$$\beta^2 = \frac{m|V_0|}{\hbar^2 \varsigma_0 G} = \frac{m\lambda s_t^2 (2-\eta)}{\hbar^2 s_l (s_l^2 - \eta^2 s_t^2)^{1/2}}.$$

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 (47) следует, что

$$\left(k_n^2 + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right)\psi_n(y) =$$

$$= -\beta^2 q\varsigma \exp(-\gamma y)\left[\psi_{n+1}(y) + \psi_{n-1}(y)\right]. \qquad (48)$$

Для решения (48) воспользуемся методом последовательных приближений по малому параметру $E >> \frac{\hbar^2}{2m}\beta^2 \xi_0 G$ или $E >> |V_0|$.

В результате волновую функцию ψ можно представить в виде ряда

$$\psi(y) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left\{ A_n \exp ik_n y - \frac{\beta^2 \xi_0 G \exp i(k_{n-1} + i\gamma) y}{k_n^2 - (k_{n-1} + i\gamma)^2} A_{n-1} - \right.$$

$$\left. - \frac{\beta^2 \xi_0 G \exp i(k_{n+1} + i\gamma) y}{k_n^2 - (k_{n+1} + i\gamma)^2} A_{n+1} \right\} \exp(i\Phi_n). \qquad (49)$$

Для нее на плоскости $y = 0$ должно выполнятся условие (9), а при $y \to \infty$ — условие излучения. При взаимодействии гармоник с амплитудами A_{-1}, A_0, A_1 спектр электронных состояний имеет вид

$$k_0 = -\frac{\xi_0^2}{4}\left[\frac{\left(k_0^2 + k_x G\right)^2}{k_{-1}} + \frac{\left(k_0^2 - k_x G\right)^2}{k_1}\right] - \frac{i\beta^2 G \xi_0^2}{2}\left\{\frac{k_0^2 + k_x G}{k_{-1}}\left[\frac{k_0 + i\gamma}{k_{-1}^2 - \left(k_0 + i\gamma\right)^2} + \frac{k_{-1} + i\gamma}{k_0^2 - \left(k_{-1} + i\gamma\right)^2}\right] + \right.$$

$$\left. + \frac{k_0^2 - k_x G}{k_1}\left[\frac{k_0 + i\gamma}{k_1^2 - \left(k_0 + i\gamma\right)^2} + \frac{k_1 + i\gamma}{k_0^2 - \left(k_1 + i\gamma\right)^2}\right] - k_0\left(\frac{\Gamma_1}{k_1} + \frac{\Gamma_{-1}}{k_{-1}}\right) + \Gamma_0 \right\}, \qquad (50)$$

где $\Gamma_0 = \dfrac{G\left(k_x - G\right) - \left(k_0 + i\gamma\right)^2}{k_{-1}^2 - \left(k_0 + i\gamma\right)^2} - \dfrac{G\left(k_x + G\right) + \left(k_0 + i\gamma\right)^2}{k_1^2 - \left(k_0 + i\gamma\right)^2}$; $\Gamma_{\pm 1} = \dfrac{\left(k_{\pm 1} + i\gamma\right) \mp k_x G}{k_0^2 - \left(k_{\pm 1} + i\gamma\right)^2}$.

В выражениях для k_n^2 энергией кванта рэлеевского звука можно пренебречь, если $\hbar\Omega << \frac{\hbar^2 G^2}{2m}$, т.е. $2\eta s_t << \frac{\hbar G}{m}$. Выбранное приближение не меняет сути физических процессов, но упрощает математические выкладки и полученные результаты применимы, когда неровности создаются стоячей звуковой волной. Дисперсионное соотношение (50) отличается от (10) слагаемыми, пропорциональными β^2, т.е. зависящими от потенциала звука. Можно показать [13], что на интервале $0 < k_x << G$ спектр электронных состояний наряду с членами, связанными с высотой неровностей (см. разд. 1), содержит члены, обусловленные потенциалом звука. Рассеяние электрона на потенциале звука препятствует созданию поверхностных электронных состояний. Поэтому необходимо создать условия, при которых электроны проводимости не попадают в поле потенциала рэлеевской 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. Если звук распространяется в диэлектрике с неровной границей и энергия электрона меньше U, то

$$k_0^0 = 0, \quad E = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m},$$
$$\delta k_0 = -\frac{\xi_0^2}{4}\left(\frac{2mU}{\hbar^2}\right)^2\left(\frac{1}{k_1} + \frac{1}{k_{-1}}\right), \qquad (51)$$

где $k_{\pm 1} = -G(G \pm 2k_x)$, $|\delta k_0| a << 1$.
Отсюда следует, что в структуре диэлектрик–вакуум–полупроводник область существования поверхностных состояний расширяется. Спектр начинается со значений $k_x = 0$. При этом $\delta k_0 = \frac{i\xi_0^2}{2G}\left(\frac{2mU}{\hbar^2}\right)^2$, $E = \frac{\hbar^2 \delta k_0^2}{2m}$.
Ширина запрещенной зоны возрастает на величину $\delta E = \frac{\hbar^2 \xi_0^2}{2m}\left(\frac{2mU}{\hbar^2}\right)$.

Заключение

Таким образом, на границе твердого тела с пологими периодическими неровностями возможно возникновение поверхностных электронных состояний. В этом случае существуют две характерные области в спектре поверхностных состояний, разделенные запрещенной зоной. При энергиях электрона меньше запрещенной зоны возникают поверхностные состояния, волновая функция которых экспоненциально убывает с расстоянием при удалении от границы. При энергиях электрона больше ширины запрещенной зоны образуются квазистационарные состояния с конечным временем жизни. Эти эффекты являются пороговыми.

Поверхностные электронные состояния приводят к зависимости концентрации электронов от координаты, перпендикулярной границе, т.е. к образованию неоднородного приграничного плазменного слоя. В результате закон дисперсии поверхностных поляритонов иной, чем в случае их распространения вдоль гладкой границы. У поверхностных электростатических колебаний появляется пространственная дисперсия частоты. Если неровности поверхности образованы рэлеевским звуком, то электроны рассеиваются не только на неровностях границы сред, но и на потенциале рэлеевского звука. Это дополнительное рассеяние препятствует образованию поверхностных электронных состояний. Электроны проводимости не испытывают влияния потенциала звука в структуре диэлектрик–вакуум–полупроводник в условиях, когда рэлеевский звук распространяется в диэлектрике. В этом случае область существования поверхностных состояний расширяется и увеличивается ширина запрещенной зоны.

1. И.Е. Тамм, *ЖЭТФ* **3**, 34 (1933).
2. W. Shockly, *Phys.Rev*. **56**, 317 (1939).
3. И.М. Лифщиц, С.И. Пекар, *УФН* **56**, 531 (1955).
4. R. Fucks and K. Kliwer, *Phys. Rev*. **A140**, 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).
8. М.В. Буртыка, В.М. Яковенко, И.В. Яковенко, *ФНТ* **21**, 628 (1995) [*Low Temp. Phys*. **21**, 489 (1995)].
9. V.A. Pogrebnyak, V.M. Yakovenko, and I.V. Yakovenko, *Phys. Lett*. **A209**, 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. С.И. Ханкина, В.М. Яковенко, И.В. Яковенко, *Радиофизика и электроника* **13**, 51 (2008).
13. С.И. Ханкина, В.М. Яковенко, И.В. Яковенко, *ЖЭТФ* **131**, 518 (2007).
14. A.O. Animaly, *Philos. Mag*. **21**, 137 (1970).
15. E.M. Ganapolskii, *Semicond. Sci. Technol*. **10**, 1707 (1995).
16. Л.В. Келдыш, *ФТТ* **4**, 2265 (1962).
17. Б.Г. Лайхтман, Ю.В. Погорельский, *ФТТ* **14**, 2765 (1972).
18. Л.Д. Ландау, И.М. Лифшиц, *Теория упругости*, Наука, Москва (1965).

Electronic states at a solid rough surface

S.I. Khankina, V.M. Yakovenko, and I.V. Yakovenko

Surface electronic states at a solid periodically rough boundary have been obtained and studied. It is shown that these are twq spectral regions of surface states separated by a forbidden band. The properties of the surface states in these regions are quite dissimilar. It is found that the action of surface electronic states gives rise to a subsurface ingomogeneous plasma layer, responsible for the peculiar features of polariton distribution and spatial dispersion of electrostatic vibration frequency. The related dispersion relations are derived. Some peculiarities of electronic state creation are considered for the case where the periodic surface rougness is caused by the Rayleigh sound propagation.

PACS: **73.20.–r** Electron states at surfaces and interfaces;
73.21.–b Electron states and collective excitations in multilayers, quantum wells, mesoscopic, and nanoscale systems.

Keywords: periodically rough, Rayleigh sound, electronic state, ingomogeneous plasma, polaritons.