

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации  
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Рязанский государственный университет имени С. А. Есенина»

М. М. Афанасова

# ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

Учебно-методическое пособие

Рязань 2022

УДК 539.21(075.8)  
ББК 22.37я73  
А94

Рецензенты:

*Е. В. Овчинникова*, канд. техн. наук, доц.  
(Рязанский государственный университет имени С. А. Есенина);  
*М. Н. Махмудов*, канд. физ.-мат. наук, доц.  
(Рязанский государственный радиотехнический университет  
имени В. Ф. Уткина)

### **Афанасова, Марина Михайловна.**

Физика твердого тела : учеб.-метод. пособие / М. М. Афанасова ; науч. ред. В. А. Степанов. — Рязань : Ряз. гос. ун-т им. С. А. Есенина, 2022. — 50 с. — Электрон. текстовые дан. (1 файл : 1,64 МВ). — 1 электрон. опт. диск (CD-ROM). — Систем. требования : IBM / PC ; Windows XP и выше ; 256 МВ RAM ; свободное место на HDD 25 МВ ; Acrobat Reader 3.0 или старше. — Загл. с экрана.

ISBN 978-5-907266-94-0

Учебно-методическое пособие содержит лекционный материал по разделам электронной теории твердого тела, в рамках которой рассмотрены фундаментальные закономерности и квантово-механические эффекты в наноразмерных гетероструктурах. Практические работы к главам позволяют выполнить аналитические исследования этих закономерностей с использованием специальных математических методов и компьютерных технологий. В рамках исследовательского подхода к решению задач возможно обнаружение малоизученных эффектов, что позволяет усвоить основные определения и теоретические положения, обрести современные научные знания.

Пособие предназначено для студентов, магистрантов, аспирантов, преподавателей технических и педагогических направлений подготовки высших учебных заведений, а также всех, интересующихся вопросами теоретической физики.

*физика твердого тела, квантовый эффект Холла, наноструктуры, вырожденный электронный газ*

УДК 539.21(075.8)  
ББК 22.37я73

ISBN 978-5-907266-94-0

© Афанасова М. М., 2022  
© Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Рязанский государственный университет имени С. А. Есенина», 2022

## ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение.....	4
Глава 1. КВАНТОВАЯ ЭЛЕКТРОННАЯ ТЕОРИЯ ТВЕРДОГО ТЕЛА.....	5
1.1. Теория Зоммерфельда.....	5
1.2. Постановка задачи в теории Зоммерфельда.....	6
1.3. Решение основной задачи в теории Зоммерфельда.....	9
1.4. Определение уровней энергии и волновых функций частицы, находящейся в несимметричной квантовой яме.....	11
1.5. Задача о двух туннельно-связанных квантовых ямах.....	12
1.6. Решение основной задачи для систем с несколькими квантовыми ямами и сверхрешеток.....	15
Практические задания по главе 1.....	20
Глава 2. КИНЕТИКА ЭЛЕКТРОНОВ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СТРУКТУРАХ.....	22
2.1. Энергетический спектр частицы в полупроводнике.....	22
2.2. Квантовое и классическое время релаксации.....	25
2.3. Физическая природа осцилляций Шубникова — де Гааза.....	26
2.4. Методы исследования осцилляций Шубникова — де Гааза.....	27
2.5. Эффект Холла.....	32
2.6. Квантовый эффект Холла.....	33
2.7. Методы создания двумерного электронного газа.....	34
2.8. Условия квантования энергетического спектра электронов.....	35
2.9. Экспериментальная установка для реализации квантового эффекта Холла.....	38
Практические задания по главе 2.....	39
Глава 3. МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА МЕТАЛЛОВ, ПОЛУПРОВОДНИКОВ И ДИЭЛЕКТРИКОВ.....	42
3.1. Теория парамагнетизма атомов и ионов.....	42
3.2. Теория Ланжевена.....	42
Практическое задание по главе 3.....	46
Заключение.....	48
Список использованных источников.....	49

## Введение

Пособие написано на основе учебных программ по дисциплинам «Физика твердого тела», «Физика низкоразмерных структур», «Современные проблемы физики. Нанoeлектроника».

Особенность изложения теоретического материала заключается в комбинации классических представлений физики твердого тела и специфики описания физических эффектов в низкоразмерных структурах. Отдельное внимание уделяется наноструктурам, представляющим собой комбинацию полупроводниковых слоев различной толщины на изолирующей подложке, и установлению фундаментальных закономерностей, обуславливающих определение электронных и оптических свойств.

Нанoeлектроника является новой областью науки и техники, формирующейся сегодня на основе последних достижений физики твердого тела, квантовой электроники, технологии полупроводниковой электроники в структурах с размером от единиц до десятков нанометров. Исследования в области нанoeлектроники важны для разработки новых принципов, а вместе с ними и нового поколения сверхминиатюрных быстродействующих систем обработки информации.

Усовершенствованный курс сложен для понимания студентов, так как сопровождается большим количеством виртуальных представлений, несмотря на то, что объект изучения реален. Эксперименты, в которых в качестве рабочего материала используются полупроводниковые структуры, с технической точки зрения проводить сложно. Автором предложен цикл практических работ с применением компьютерного моделирования, при выполнении которых студенты могут оценить параметры, характеризующие изучаемую структуру, а также выявить и проанализировать процессы, происходящие при различных физических условиях. Методы анализа структуры, описанные в пособии, разработаны и используются учеными для исследования металлов, полупроводников и наноразмерных структур на их основе.

## Глава 1

# КВАНТОВАЯ ЭЛЕКТРОННАЯ ТЕОРИЯ ТВЕРДОГО ТЕЛА

### 1.1. Теория Зоммерфельда

Одна из основных задач квантовой электронной теории твердого тела заключается в построении энергетического спектра (то есть в нахождении всевозможных значений энергий) для электронов, содержащихся в данном теле. Зная структуру спектра, можно определить все основные свойства кристалла. Кристаллическое тело в данном случае представляет систему взаимодействующих электронов, движущихся в поле положительных ионов, которые совершают тепловые колебания около узлов кристаллической решетки как около центров равновесия. Поведение  $i$ -го электрона описывается в квантовой теории волновой функцией  $\psi(x, y, z, t)$ , являющейся функцией координат электрона  $x, y, z$  и времени  $t$ .

Если считать, что ионы решетки кристалла жестко закреплены в ее узлах, средних по времени их координат, иными словами, если считать поле ионов решетки стационарным, неизменным во времени, то волновая функция  $\psi_i$  будет иметь вид

$$\psi_i(x_i, y_i, z_i, t) = \psi_i(x_i, y_i, z_i) \cdot e^{-\frac{2\pi i}{h} W_i t}, \quad (1)$$

где  $W_i$  — энергия  $i$ -го электрона.

Функция  $\psi(x_i, y_i, z_i, t)$  может быть найдена из уравнения Шредингера для  $i$ -го электрона:

$$\Delta \psi_i + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (W_i - U_i) \psi_i = 0, \quad (2)$$

где  $U_i = U_i^+ + U_i^-$  — потенциальная энергия  $i$ -го электрона, состоящая из энергии его взаимодействия с ионами решетки  $U_i^+$  и энергии взаимодействия с остальными электронами кристалла  $U_i^-$ .

Отметим, что уравнение (2) имеет такой же вид, как и соответствующее уравнение для свободной частицы, поскольку здесь величина  $W_i - U_i$  также является кинетической энергией электрона. Квадрат модуля волновой функции  $\psi_i(x_i, y_i, z_i)$  равен вероятности  $\omega_i$  того, что электрон находится в месте, определяемом координатами  $x_i, y_i, z_i$ :

$$\psi_i \cdot \psi_i^* = \omega_i, \quad (3)$$

при условии, что функция  $\psi_i$  нормирована к единице:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i(x_i, y_i, z_i) \psi_i^*(x_i, y_i, z_i) dx_i dy_i dz_i = 1. \quad (4)$$

Таким образом, состояние электрона в квантовой теории описывается не обозначением его трех координат и трех компонент импульса как функций времени, как это делается в классической механике, а волновой функцией  $\psi_i$ , имеющей вероятностный смысл и являющейся функцией координат и времени, что учитывает волновые свойства электронов.

Состояние системы  $N$  электронов в кристаллическом теле определяется квантовой теорией с помощью волновой функции координат всех электронов системы и времени:

$$\psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dots, x_N, y_N, z_N, t). \quad (5)$$

Поскольку и в данном случае волновая функция  $\psi$  такова, что  $\psi \cdot \psi^*$ , есть вероятность того, что одновременно каждый  $i$ -ый электрон системы имеет координаты  $x_i, y_i$  и  $z_i$ , а вероятность нескольких одновременных независимых событий равна произведению вероятностей каждого из этих событий. Исходя из этого, целесообразно положить, что

$$\psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dots, x_N, y_N, z_N, t) = \prod_{i=1}^{i=N} \psi_i(x_i, y_i, z_i, t), \quad (6)$$

хотя это не вполне правомерно, так как электроны взаимодействуют между собой, но в данном случае это взаимодействие игнорируется.

Если поле ионов кристаллической решетки считать стационарным, то каждую из волновых функций  $\psi_i(x_i, y_i, z_i, t)$  можно найти, определив  $\psi_i(x_i, y_i, z_i, t)$  из уравнения Шредингера (5), умноженное на  $e^{\frac{2\pi i}{h} W_i t}$ .

Однако решение этой задачи в общем случае, при рассмотрении реальных полей и межчастичных взаимодействий в кристалле, весьма сложно и до сих пор не найдено. Полученные приближенные решения, являющиеся лишь частными случаями этой общей задачи, найдены только после того, как условия были так или иначе упрощены введением ряда различных схематизаций.

## 1.2. Постановка задачи в теории Зоммерфельда

В качестве первого приближения рассмотрим решение задачи о состояниях электронов в кристаллическом теле, предложенное теорией Зоммерфельда.

Каждый электрон в кристалле находится в потенциальном силовом поле, состоящем из поля ионов кристаллической решетки и поля всех остальных электронов. Потенциал поля положительных ионов решетки кристалла является периодической функцией координат с периодом решетки. Поле взаимодействующих электронов вследствие их непрерывного движения переменна в пространстве и времени. Однако в теории Зоммерфельда взаимодействие электронов учитывается некоторым средним полем, не изменяющимся с течением времени. Тогда энергия любого из электронов системы, находящегося в поле остальных электронов кристалла, будет одной и той же функцией координат для всех электронов. В таком случае движение каждого электрона в кристалле можно считать независимым от остальных электронов. Тогда волновая функция  $\Psi$  для системы всех электронов, содержащихся в кристалле, представляется в виде

$$\Psi = \prod_{i=1}^{i=N} \Psi_i(x_i, y_i, z_i, t). \quad (7)$$

В теории Зоммерфельда указанное среднее поле взаимодействующих электронов считается как раз таким, что, налагаясь на поле ионов решетки, оно полностью компенсирует периодические изменения его потенциала. Таким образом, потенциальная энергия любого из электронов в кристалле, если вне кристалла считать ее равной нулю, будет равна

$$U = -U_0 = -eV = const < 0,$$

где  $V = \text{const} > -0$  — потенциал результирующего поля в кристалле, то есть  $U$  будет отрицательна и одинакова для всех электронов, находящихся в любом месте кристалла. Только у границ твердого тела с вакуумом потенциальная энергия скачком изменяется от значения  $U_0 < 0$  до нуля. Иными словами, все электроны кристалла находятся в потенциальной яме глубиной  $V_0$  с гладким дном и вертикальными стенками.

Если кинетическая энергия электрона в кристалле  $W_k < |U_0|$ , то его полная энергия также меньше нуля:

$$W = W_k + U = W_k - U_0 < 0.$$

Такой электрон оказывается запертым в потенциальной яме: он не может выйти за пределы тела, так как не в состоянии преодолеть потенциальный барьер, существующий у его границ, высота которого  $A$  равна разности между минимальной энергией электрона вне кристалла (принимаемой за нуль) и его энергией внутри кристалла, следовательно,

$$A = W_k - |U_0|.$$

Однако для электрона, находящегося вне твердого тела, всегда  $W \geq 0$ , и  $W = 0$  для покоящегося электрона.

Проиллюстрируем сказанное с помощью рисунка 1, где по оси абсцисс откладывается расстояние  $r$  от границы кристалла  $r=0$  внутри его, а по оси ординат — значения энергии электрона  $W$ .

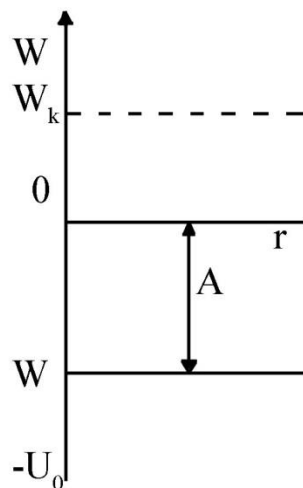


Рис. 1. Зависимость энергии электрона от расстояния до границы

При указанных предположениях для любого из электронов кристалла применимо одно и то же уравнение Шредингера:

$$\Delta\Psi + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (W - U)\Psi = 0, \quad (8)$$

поскольку член в нем,  $U = -U_0 = \text{const}$ , один и тот же для любого из электронов.

Решение уравнения (8) удобно искать в виде произведения трех функций:

$$\Psi(x, y, z) = \Psi_1(x) \cdot \Psi_2(y) \cdot \Psi_3(z). \quad (9)$$

Тогда, в соответствии с уравнением (8),

$$\Delta\Psi = \frac{1}{\Psi_1} \cdot \frac{\partial^2\Psi_1}{\partial x^2} \Psi_1\Psi_2\Psi_3 + \frac{1}{\Psi_2} \cdot \frac{\partial^2\Psi_2}{\partial y^2} \Psi_1\Psi_2\Psi_3 + \frac{1}{\Psi_3} \cdot \frac{\partial^2\Psi_3}{\partial z^2} \Psi_1\Psi_2\Psi_3 = \frac{8\pi^2 m}{h^2} (U - W) \Psi_1\Psi_2\Psi_3.$$

Сократим данное равенство на  $\Psi_1\Psi_2\Psi_3$  и представим величины  $U = const$  и  $W = const$  соответственно в виде суммы трех функций поочередно одной из трех переменных  $x$ ,  $y$  и  $z$ :

$$\begin{aligned} U &= U_1(x) + U_2(y) + U_3(z) = const \\ W &= W_1(x) + W_2(y) + W_3(z) = const. \end{aligned} \quad (10)$$

Получим:

$$\frac{1}{\Psi_1} \cdot \frac{\partial^2\Psi_1}{\partial x^2} + \frac{1}{\Psi_2} \cdot \frac{\partial^2\Psi_2}{\partial y^2} + \frac{1}{\Psi_3} \cdot \frac{\partial^2\Psi_3}{\partial z^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (W_1 + W_2 + W_3 - U_1 - U_2 - U_3) = 0,$$

или

$$\sum_{i=1}^{i=3} \left[ \frac{1}{\Psi_i} \cdot \frac{d^2\Psi_i}{dx_i^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (W_i - U_i) \right] = 0,$$

где  $x_1 = x$ ,  $x_2 = y$ ,  $x_3 = z$ ,  $\frac{\partial^2\Psi_i}{\partial x_i^2} = \frac{d^2\Psi_i}{dx_i^2}$ , поскольку  $\Psi_i = \Psi_i(x_i)$ . Но если сумма трех функций вида  $F(x, y, z) = X(x) + Y(y) + Z(z) = const$  есть постоянная величина при любых значениях переменных  $x$ ,  $y$  и  $z$  (в рассматриваемом случае  $W(x, y, z) \sim const$  и  $U(x, y, z) = const$  по условию), то  $X(x) = const$ ,  $Y(y) = const$ ,  $Z(z) = const$ .

Действительно, при  $F(x, y, z) = const$  получим:

$$\frac{\partial F}{\partial x} = \frac{dX}{dx} = 0; \quad \frac{\partial F}{\partial y} = \frac{dY}{dy} = 0; \quad \frac{\partial F}{\partial z} = \frac{dZ}{dz} = 0,$$

откуда и следует, что  $X(x) = const$ ,  $Y(y) = const$ ,  $Z(z) = const$ . Следовательно, уравнение (8) распадается на три тождественных уравнения, которые, если отбросить в них индексы, имеют вид

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} (W - U)\Psi = 0. \quad (11)$$

Решив уравнение (11) сначала в одномерном случае и составив всевозможные комбинации произведений найденных решений для различных координат, получим решение задачи для трехмерного кристалла. Заметим, что мы будем рассматривать лишь случай, когда электроны находятся в кристалле, то есть когда их энергия  $W < 0$ . Случай же, когда  $W > 0$ , то есть когда электрон находится вне потенциальной ямы (вне тела), нас не интересует, поэтому мы его рассматривать не будем.

Прежде чем приступать к решению уравнения Шредингера (11) для одномерного кристалла, сделаем еще одно предположение, упрощающее решение задачи. Поскольку выбор начала отсчета потенциальной энергии не имеет значения, будем считать, что внутри тела  $U = 0$ , а на его границах с вакуумом происходит скачок потенциальной энергии. Так как энергия электро-



нов в кристалле обычно намного меньше энергии свободного покоящегося электрона, то есть глубины потенциальной ямы, результат решения задачи практически не изменится, если будем считать, что на границах тела потенциальная энергия скачком изменяется от нуля до бесконечности (рис. 2). Тогда вне кристалла, очевидно,  $\Psi(x)=0$ , так как невозможен выход электрона из потенциальной ямы с бесконечно высокими стенками. Для области значений координаты  $x$  внутри кристалла, поскольку  $U = 0$ , уравнение Шредингера принимает вид

$$\frac{d^2\Psi}{dx^2} + \frac{8\pi^2 m}{h^2} W\Psi = 0, \quad (12)$$

причем  $W$  будет полной энергией электрона, потому что при равенстве нулю потенциальной энергии полная энергия равна кинетической.

### 1.3. Решение основной задачи в теории Зоммерфельда

Уравнение Шредингера позволяет найти пси-функцию данного состояния и, следовательно, определить вероятность нахождения частицы в различных точках пространства.

В соответствии со своим смыслом пси-функция должна быть однозначной, непрерывной и конечной (за исключением особых точек). Кроме того, она должна иметь непрерывную и конечную производную. Совокупность перечисленных требований носит название *стандартных условий*.

Найдем собственные значения энергии и соответствующие им собственные функции для частицы, находящейся в бесконечно глубокой одномерной потенциальной яме (рис. 2). Частица может двигаться вдоль оси  $X$ , ее движение ограничено непроницаемыми для частицы стенками:  $x = 0$  и  $x = L$ . Потенциальная энергия  $U$  в этом случае равна нулю при  $0 \leq x \leq L$  и обращается в бесконечность при  $x < 0$  и  $x > L$ .

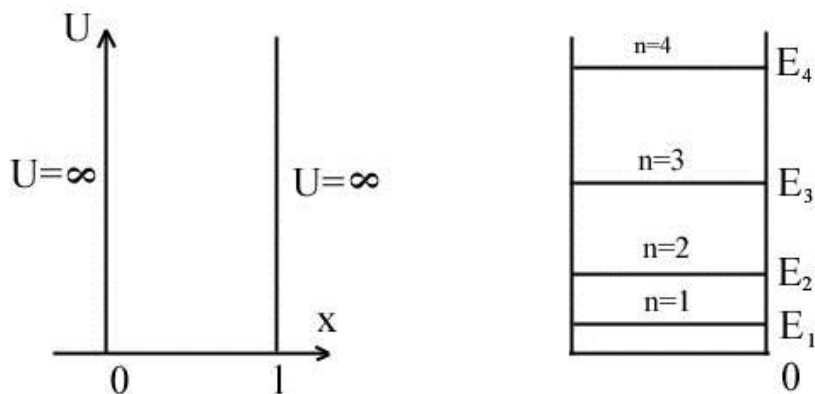


Рис. 2. Потенциальная энергия одномерной бесконечно глубокой потенциальной ямы и дискретный спектр энергии

Поскольку пси-функция зависит только от координаты  $x$ , уравнение Шредингера имеет вид

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E-U) \psi = 0.$$

За пределами ямы пси-функция равна нулю, из условия непрерывности она равна нулю и на границах ямы, то есть

$$\psi(0) = \psi(L) = 0.$$

В области, где  $\psi$  не равна тождественно нулю, уравнение Шредингера примет вид

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E\psi = 0.$$

В этой области  $U = 0$ , введя обозначение

$$\omega^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E, \quad (13)$$

придем к уравнению, хорошо известному из теории колебаний:

$$\psi'' + \omega^2 \psi = 0.$$

Решение такого уравнения имеет вид

$$\psi(x) = a \sin(\omega x + \alpha). \quad (14)$$

Применяя граничные условия, имеем

$$\psi(0) = a \sin \alpha,$$

откуда следует, что  $\alpha = 0$ :

$$\begin{aligned} \psi(L) &= a \sin \omega L \\ \omega L &= \pm n\pi \quad (n = 1, 2, 3, \dots) \end{aligned} \quad (15)$$

( $n = 0$  отпадает, поскольку при этом получается, что  $\psi \equiv 0$  — частица нигде не находится).

Исключив  $\omega$  (13), (15), найдем собственные значения энергии частицы:

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (16)$$

Спектр энергии будет дискретным.

Подставив в (14) значение  $\omega$ , получающееся из условия (15), найдем собственные функции задачи:

$$\psi_n(x) = a \sin \frac{n\pi x}{L}. \quad (17)$$

Для нахождения коэффициента  $a$  воспользуемся условием нормировки  $\psi(0) = \psi(L) = 0$ , которое в данном случае запишем следующим образом:

$$a^2 \int_0^L \sin^2 \frac{n\pi x}{L} dx = 1.$$

На концах промежутка интегрирования подинтегральная функция обращается в ноль, поэтому значение интеграла можно получить, умножив среднее значение  $\sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$  (равное,

как известно,  $\frac{1}{2}$ ) на длину промежутка  $L$ . В результате получится:  $a^2 \left(\frac{1}{2}\right)L = 1$ , откуда  $a = \sqrt{\frac{2}{L}}$ . Таким образом, собственные функции имеют вид

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin \frac{n\pi x}{L} \quad (n = 1, 2, 3, \dots). \quad (18)$$

#### 1.4. Определение уровней энергии и волновых функций частицы, находящейся в несимметричной квантовой яме

Рассмотрим несимметричную квантовую яму с произвольно заданными барьерами (рис. 3).

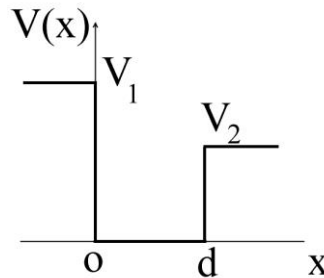


Рис. 3. Потенциальный профиль квантовой ямы

Приведем решение уравнения Шредингера и нахождение волновых функций частицы. Уравнение Шредингера для трех областей имеет вид:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + (E - V_1)\psi &= 0 & (x < 0), \\ \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + E\psi &= 0 & (0 < x < d), \\ \frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dx^2} + (E - V_2)\psi &= 0 & (x > d). \end{aligned} \quad (19)$$

Вводя обозначения

$$\chi = \frac{\sqrt{2m(-E)}}{\hbar}, \quad \chi_1 = \frac{\sqrt{2\mu(V_1 - E)}}{\hbar}, \quad \chi_2 = \frac{\sqrt{2m(V_2 - E)}}{\hbar}, \quad (20)$$

находим, что общее решение в каждой области имеет следующий вид:

$$\begin{aligned} \psi_n(x) &= A_1 e^{-\chi_1 x} + B_1 e^{-\chi_1 x} & (x < 0), \\ \psi_n(x) &= A e^{-\chi x} + B e^{-\chi x} & (0 < x < d), \\ \psi_n(x) &= A_2 e^{-\chi_2 x} + B_2 e^{-\chi_2 x} & (x > d). \end{aligned} \quad (21)$$

Рассмотрим дискретный спектр  $E < V_2$ . Тогда  $\chi_1$  и  $\chi_2$  — действительные величины. Полагая в области  $0 < x < d$ ,  $\chi = ik$ , где  $k$  — действительно, запишем решение в виде

$$\psi = \sin(kx + \delta) \quad (0 < x < d).$$

В силу конечности волновой функции,  $A_1=0$ ,  $B_2=0$ . Условие непрерывности  $\psi$  и  $\frac{d\psi}{dx}$  удобнее записать как условие непрерывности логарифмической производной  $\frac{1}{\psi} \frac{d\psi}{dx}$ :

$$\begin{aligned}\chi_1 &= k \operatorname{ctg} \delta, \\ -\chi_2 &= k \operatorname{ctg}(kd + \delta).\end{aligned}$$

Перепишем последние два условия, подставив значения  $\chi_1$  и  $\chi_2$  из формулы (20). Получим:

$$\frac{\sqrt{2\mu(V_1 - E)}}{\hbar k} = \operatorname{ctg} \delta, \quad -\frac{\sqrt{2\mu(V_2 - E)}}{\hbar k} = \operatorname{ctg}(kd + \delta).$$

Так как  $\operatorname{ctg}$  является периодической функцией с периодом  $\pi$ , величину  $\delta$  и  $kd + \delta$  можно представить в следующем виде:

$$\delta = \arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_1}} + n_1\pi \quad \text{и} \quad ka + \delta = -\arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_2}} + n_2\pi.$$

Исключая  $\delta$ , находим трансцендентное уравнение для определения уровней энергий в дискретном спектре:

$$kd = -\arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_2}} + n\pi - \arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_1}}. \quad (22)$$

Значения  $k$ , удовлетворяющие этому уравнению, удобно находить графически. Эти значения определяются точками пересечения прямой  $y = dk$  и кривыми  $y = -\arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_2}} + n\pi - \arcsin \frac{\hbar k}{\sqrt{2mV_1}}$ . Определив значения  $k$ , можно оценить и величину энергии для каждого уровня по формуле (20).

### 1.5. Задача о двух туннельно-связанных квантовых ямах

Рассмотрим потенциальный профиль (рис. 4), который состоит из двух потенциальных ям и барьера конечной высоты  $V_0$ , заключенного между ними. Ширина квантовых ям одинакова и равна  $a$ . Ширина барьера —  $b$ .

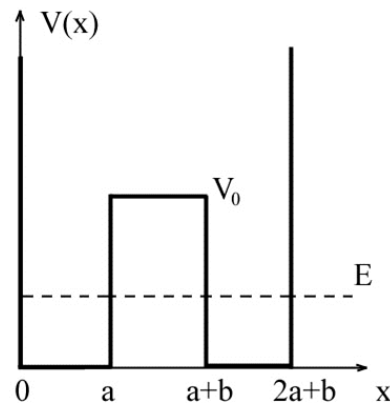


Рис. 4. Потенциальный профиль системы квантовых ям

Запишем уравнение Шредингера для трех областей:

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi}{dx^2} + E\psi &= 0 \text{ для области } 0 < x < a, \\ \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi}{dx^2} + (V_0 - E)\psi &= 0 \text{ для области } a < x < a+b \\ \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi}{dx^2} + E\psi &= 0 \text{ для области } a+b < x < 2a+b. \end{aligned} \quad (23)$$

Решение этих уравнений будем искать соответственно в виде

$$\begin{aligned} \psi_I &= A \cdot \sin kx, \\ \psi_{II} &= B_1 e^{\chi x} + B_2 e^{-\chi x}, \\ \psi_{III} &= C \cdot \sin k(2a+b-x), \end{aligned}$$

где  $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ ,  $\chi = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}$ .

Условия непрерывности волновой функции и ее производной приводят к следующим соотношениям:

$$\begin{aligned} A \sin ka &= B_1 e^{\chi a} + B_2 e^{-\chi a}, \\ Ak \cos ka &= \chi(B_1 e^{\chi a} - B_2 e^{-\chi a}), \\ B_1 e^{\chi(a+b)} + B_2 e^{-\chi(a+b)} &= C \sin ka, \\ \chi(B_1 e^{\chi(a+b)} - B_2 e^{-\chi(a+b)}) &= -Ck \cos ka. \end{aligned}$$

Исключая из этих уравнений  $B_1$  и  $B_2$ , находим:

$$\begin{aligned} \left(\frac{\chi}{k} \operatorname{tg} ka + 1\right) A e^{\chi b} &= \left(\frac{\chi}{k} \operatorname{tg} ka - 1\right) C, \\ \left(\frac{\chi}{k} \operatorname{tg} ka - 1\right) A e^{-\chi b} &= \left(\frac{\chi}{k} \operatorname{tg} ka + 1\right) C. \end{aligned} \quad (24)$$

Из условия обращения в нуль детерминанта

$$\begin{vmatrix} \left(\frac{\chi}{k} \operatorname{tg} ka + 1\right) e^{\chi b} & -\left(\frac{\chi}{k} \operatorname{tg} ka - 1\right) \\ \left(\frac{\chi}{k} \operatorname{tg} ka - 1\right) e^{-\chi b} & -\left(\frac{\chi}{k} \operatorname{tg} ka + 1\right) \end{vmatrix} = 0 \quad (25)$$

получаем трансцендентное уравнение, определяющее уровни энергии:

$$\left(\frac{\chi}{k} \operatorname{tg} ka + 1\right) e^{\chi b} = \pm \left(\frac{\chi}{k} \operatorname{tg} ka - 1\right). \quad (26)$$

Воспользовавшись неравенством  $\chi b \gg 1$ , последнее уравнение можно приближенно представить в следующем виде:

$$\operatorname{tg} ka = -\frac{k}{\chi} \mp 2 \frac{k}{\chi} e^{-\chi b}.$$

Правая часть равенства представляет собою малую величину. В нулевом приближении получаем ( $k \ll \chi$ ):

$$k_0 = \frac{n\pi}{a}, \quad E_n^{(0)} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}$$

— это значения энергии для частицы в потенциальном ящике бесконечной глубины. В следующем приближении имеем:

$$k = \frac{n\pi}{a} - \frac{k_0}{a\chi_0} \mp 2 \frac{k_0}{a\chi_0} e^{-\chi_0 b} \quad (n = 1, 2, 3, \dots), \quad (27)$$

$$E_n = E_n^{(0)} - \frac{2E_n^{(0)}}{a\chi_0} \mp 4 \frac{E_n^{(0)}}{a\chi_0} e^{-\chi_0 b}, \quad (28)$$

где  $\chi_0 = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E_n^{(0)})}}{\hbar}$ .

Первые два члена,  $E_n^{(1)} = E_n^{(0)} - \frac{2E_n^{(0)}}{a\chi_0}$ , не зависят от  $b$  и дают приближенные значения уровней энергии для частицы в потенциальной яме (рис. 5) ( $b \rightarrow \infty$ ).

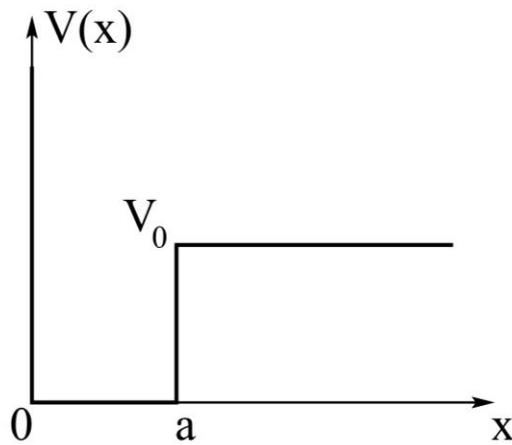


Рис. 5. Потенциальный профиль квантовой ямы

В этом приближении уровни энергии двукратно вырождены; это соответствует возможности нахождения частицы как в области I, так и в III.

Учет конечности  $b$ , то есть возможности прохождения частицы через потенциальный барьер, приводит к расщеплению уровней. Это расщепление экспоненциально мало. Найдем в рассматриваемом приближении коэффициенты  $A$ ,  $B_1$ ,  $B_2$  и  $C$ . Нижнему уровню,

$$E_n^- = E_n^{(1)} - 4 \frac{E_n^{(0)}}{a\chi_0} e^{-\chi_0 b}, \quad (29)$$

соответствуют коэффициенты  $B_1 = (-1)^{n-1} \frac{k_0}{\chi_0} e^{-\chi_0(b+a)} A$ ,  $C = A$ ,  $B_2 = (-1)^{n-1} \frac{k_0}{\chi_0} e^{-\chi_0 a} A$ .

Верхнему уровню,

$$E_n^+ = E_n^{(1)} + 4 \frac{E_n^{(0)}}{a\chi_0} e^{-\chi_0 b}, \quad (30)$$

соответствуют коэффициенты  $B_1 = -(-1)^{n-1} \frac{k_0}{\chi_0} e^{-\chi_0(b+a)} A$ ,  $C = -A$ ,  $B_2 = (-1)^{n-1} \frac{k_0}{\chi_0} e^{-\chi_0 a} A$ . Значение  $A$ , определяемое из условия нормировки, равно  $\frac{1}{\sqrt{a}}$  (при вычислении нормировочного интеграла долей вносимой областью II можно пренебречь).

Таким образом, нижнему уровню соответствует волновая функция

$$\begin{aligned} \psi_I &= \frac{1}{\sqrt{a}} \sin kx, \\ \psi_{II} &= (-1)^{n-1} \frac{1}{\sqrt{a}} \frac{k_0}{\chi_0} \left\{ e^{-\chi_0(x-a)} + e^{-\chi_0(a+b-x)} \right\}, \\ \psi_{III} &= \frac{1}{\sqrt{a}} \sin k(2a+b-x). \end{aligned} \quad (31)$$

Соответственно, для верхнего уровня находим:

$$\begin{aligned} \psi_I &= \frac{1}{\sqrt{a}} \sin kx, \\ \psi_{II} &= (-1)^{n-1} \frac{1}{\sqrt{a}} \frac{k_0}{\chi_0} \left\{ e^{-\chi_0(x-a)} - e^{-\chi_0(a+b-x)} \right\}, \\ \psi_{III} &= -\frac{1}{\sqrt{a}} \sin k(2a+b-x). \end{aligned} \quad (32)$$

## 1.6. Решение основной задачи для систем с несколькими квантовыми ямами и сверхрешеток

Сближение  $n$  ям на расстояние  $b$  образует одномерную систему квантовых ям с периодом  $c=a+b$ . Спектр системы будет существенно зависеть от степени перекрытия волн, функций, центрированных в различных ячейках сверхрешетки. Если же волновые функции заметно перекрываются, то, благодаря туннелированию, роль которого увеличивается по мере уменьшения периода сверхрешетки  $c$ , дискретные уровни расширяются в зоны из  $n$  близко расположенных уровней. Таким образом, в сверхрешетке имеется хотя бы одна подбарьерная минizona. Модель сверхрешетки хорошо описывается моделью Кронига — Пенни, согласно которой электроны находятся в потенциальном поле ионов кристаллической решетки.

Для нахождения энергетического спектра сверхрешетки рассмотрим одномерный кристалл, имеющий длину  $L$  вдоль оси  $x$  (рис. 6). Потенциальная энергия решетки кристалла представляется периодически чередующимися потенциальными ямами с гладким дном шириной  $a$ , где  $U=0$ , разделенными потенциальными барьерами шириной  $b$  и высотой  $U_0$ , причем  $a + b = c$  ( $c$  — период решетки). В соответствии с принципами квантовой механики необходимо решить уравнение Шредингера:

$$\frac{h^2}{8\pi^2 m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + (E(x) - U(x))\psi = 0. \quad (33)$$

$U(x)$  должна удовлетворять условию периодичности:  $U(x) = U(x + nd)$ ,  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ .

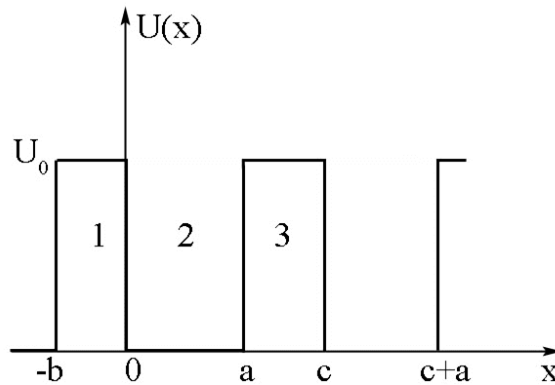


Рис. 6. Потенциальный профиль связанных  $n$ -квантовых ям

Запишем уравнение Шредингера для областей 1, 2, 3:

а) для области 1 и 3, где  $-b \leq x \leq 0$  и  $nc+a \leq x \leq (n+1)c$ :

$$\frac{h^2}{8\pi^2 m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + (E - U_0)\psi = 0 \quad (34.1), \text{ заменим } \beta^2 = \frac{8\pi^2 m}{h^2} (E - U_0) \quad (35.1)$$

б) для области 2, где  $0 \leq x \leq a$  и  $nc \leq x \leq nc+a$ :

$$\frac{h^2}{8\pi^2 m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + E\psi = 0 \quad (34.2), \text{ заменим } \alpha^2 = \frac{8\pi^2 m}{h^2} E \quad (35.2)$$

Общие решения уравнений (34.1), (34.2), (35.1), (35.2) будут представлены в следующем виде:

$$\begin{aligned} \psi_1(x) &= Ce^{\beta x} + De^{-\beta x}, \\ \psi_2(x) &= Ae^{i\alpha x} + Be^{-i\alpha x}, \\ \psi_3(x) &= C_1 e^{\beta x} + D_1 e^{-\beta x}, \end{aligned} \quad (36)$$

где  $A, B, C, D, C_1, D_1$  — постоянные интегрирования.

Объединим решения с помощью граничных условий (37.1) и (37.2):

$$\psi_1(0) = \psi_2(0), \quad \psi_2(a) = \psi_3(a), \quad (37.1)$$



$$\left(\frac{d\psi_1}{dx}\right)_{x=0} = \left(\frac{d\psi_2}{dx}\right)_{x=0}, \quad \left(\frac{d\psi_2}{dx}\right)_{x=a} = \left(\frac{d\psi_3}{dx}\right)_{x=a}. \quad (37.2)$$

Вследствие периодичности строения кристалла и тождественности его элементарных ячеек должен быть периодичен квадрат модуля волновой функции  $\psi$  с периодом решетки  $c$ :

$$|\psi(x)|^2 = |\psi(x - nc)|^2 \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots),$$

так как вероятности нахождения электрона в точках  $x$  и  $x - nc$ , вследствие тождественности условий для них, должны быть одинаковы. В частности, функции  $\psi_3(x)$  и  $\psi_1(x)$  должны быть связаны соотношением

$$|\psi_3(x)|^2 = |\psi_1(x - c)|^2.$$

Следовательно, функция  $\psi_3(x)$  для значений  $x$  в интервале  $a \leq x \leq c$  может отличаться от функции  $\psi_1(x)$  для значений  $x$  в интервале  $-b \leq x \leq 0$  лишь фазовым множителем  $e^{i\varphi}$ , таким, что  $|e^{i\varphi}|^2 = 1$ , то есть

$$\psi_3(x) = e^{i\varphi} \psi_1(x - c).$$

Из этого условия следует, что для волновой функции  $\psi_1(x)$  и  $\psi_3(x)$  должно выполняться равенство

$$C_1 e^{\beta x} + D_1 e^{-\beta x} = e^{i\varphi} [C e^{\beta(a-c)} + D e^{-\beta(a-c)}].$$

Из указанных выше граничных условий для волновых функций  $\psi_1(x)$ ,  $\psi_2(x)$  и  $\psi_3(x)$  и из условия непрерывности первых производных с учетом  $a - c = b$  следует, что

$$\begin{cases} A+B-C-D=0 \\ i\alpha A - i\alpha B - \beta C + \beta D = 0 \\ Ae^{i\alpha a} + Be^{-i\alpha a} - Ce^{i\varphi - \beta b} - De^{i\varphi + \beta b} = 0 \\ i\alpha Ae^{i\alpha a} - i\alpha Be^{-i\alpha a} - \lambda Ce^{i\varphi - \beta b} + \lambda De^{i\varphi + \beta b} = 0. \end{cases} \quad (38)$$

Граничные условия представляют собой систему четырех уравнений для нахождения четырех постоянных интегрирования  $A, B, C, D$ . Так как все уравнения этой системы однородны, то система имеет отличные от нуля решения, если ее определитель равен нулю:

$$\Delta = \begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ i\alpha & -i\alpha & -\alpha & \alpha \\ e^{i\alpha a} & e^{-i\alpha a} & -e^{i\varphi - \beta b} & -e^{i\varphi + \beta b} \\ i\alpha e^{i\alpha a} & -i\alpha e^{-i\alpha a} & -\beta e^{i\varphi - \beta b} & \lambda e^{i\varphi + \beta b} \end{vmatrix} = 0.$$

Раскрыв определитель, получим уравнение

$$\frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\beta\alpha} \sin \alpha a \operatorname{sh} \alpha b + \cos \alpha a \operatorname{ch} \beta b = \cos \varphi, \quad (39)$$

устанавливающее связь между  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\varphi = kc$ , так как  $\alpha$  и  $\beta$  выражаются через энергию электрона  $E$  по формулам (35.1) и (35.2).

Рассматривая интервал  $-\frac{n\pi}{d} \leq k \leq \frac{n\pi}{d}$ , определим, что  $\cos(kc)$  будет изменяться от  $-1$  до  $1$ . Тогда уравнение (39) примет вид

$$-1 \leq \frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\beta\alpha} \sin \alpha a \operatorname{sh} \beta b + \cos \alpha a \operatorname{ch} \beta b \leq 1. \quad (40)$$

Решим уравнение (39) графическим образом. Для этого построим функцию  $f\left(\frac{E}{U}\right)$ :

$$f\left(\frac{E}{U}\right) = \frac{\beta^2 - \alpha^2}{2\beta\alpha} \sin \alpha a \operatorname{sh} \beta b + \cos \alpha a \operatorname{ch} \beta b. \quad (41)$$

Произведем замену:

$$\frac{E}{U} = x, \quad H = \sqrt{\frac{8\pi^2 m}{h^2} U},$$

тогда формула (41) примет вид

$$f(x) = \frac{(1-2x)}{2(x(1-x))^{\frac{1}{2}}} \sin(Hax^{\frac{1}{2}}) \operatorname{sh}(Hb(1-x)) + \cos(Hax^{\frac{1}{2}}) \operatorname{ch}(Hb(1-x)^{\frac{1}{2}}), \quad (42)$$

где  $a$  — ширина квантовой ямы,  $b$  — ширина потенциального барьера.

Вид функции  $f(x)$  представлен на рисунке 7.

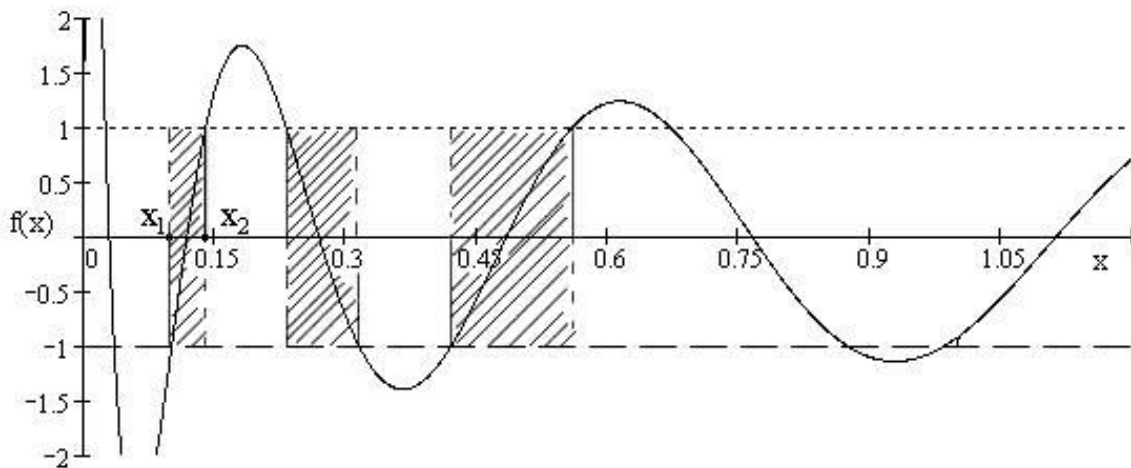


Рис. 7. Решение трансцендентного уравнения графическим методом

Согласно уравнению (39), любому данному значению  $kc$  соответствует определенное значение  $f\left(\frac{E}{U}\right)$  и  $E$ . При этом всегда  $|\cos(kc)| \leq 1$ . Из рисунка 7 видно, что области значений  $\frac{E}{U}$ , где функция  $f\left(\frac{E}{U}\right) \leq 1$ , чередуются с областями, где  $f\left(\frac{E}{U}\right) > 1$ . Это значит, что уравнение (41) не имеет корней  $\frac{E}{U}$  в тех областях значений, где  $f\left(\frac{E}{U}\right) < 1$ , то есть такие значения  $\frac{E}{U}$  невозможны. Таким образом, спектр возможных значений в кристалле состоит из отдельных полос или зон, разделенных зонами значений энергии, которыми электроны обладать не могут. Зонам возможных значений энергии электронов соответствуют области  $f\left(\frac{E}{U}\right) < 1$ , а зонам невозможных значений — области  $f\left(\frac{E}{U}\right) > 1$ . Ширина зон возможных значений энергии электронов тем больше, чем больше соотношение  $\frac{E}{U}$ , то есть чем больше энергия. При этом зоны значений энергии, которыми электроны в кристалле обладать не могут, суживаются.

В неограниченном кристалле внутри каждой из зон значений энергии, возможных для электронов, спектр энергии сплошной: энергия электронов такого кристалла внутри каждой из зон может изменяться непрерывно.

Ширина энергетических зон зависит и от величины постоянного множителя  $K = \frac{4\pi^2}{h^2} mabU$ , характеризующего потенциальные барьеры поля кристаллической решетки.

При  $K \rightarrow 0$ , что будет иметь место при  $b = \text{const}$ , а  $U_0 \rightarrow 0$ , уравнение (41) примет вид

$$\cos \alpha a = \cos ka,$$

откуда  $\alpha = k$ . Так как  $k$  может изменяться непрерывно, то  $\alpha$ , а значит, и  $E$  (35.2) также могут изменяться непрерывно и принимать любые значения. В данном предельном случае при  $U_0 \rightarrow 0$  получаем выражение для энергии свободного электрона, которая может изменяться непрерывно. Спектр энергии электрона оказывается сплошным, запрещенные зоны исчезают.

При  $K \rightarrow \infty$ , что будет иметь место при  $b = \text{const}$ ,  $U_0 \rightarrow \infty$ , уравнение (41) примет вид

$$\frac{\sin \alpha a}{\alpha a} + \frac{1}{K} \cos \alpha a = \frac{1}{K} \cos ka$$

и обращается в условие  $\sin \alpha a = 0$ .

В данном случае, соответствующем сильно связанному электрону в пределах одной элементарной ячейки кристалла, получаем дискретный ряд возможных значений  $\alpha$ , удовлетворяющий условию  $\alpha a = n\pi$  ( $n = 0, 1, 2, \dots$ ) или  $\alpha = \frac{n\pi}{a}$ . Следовательно, возможные значения энергии электрона также образуют дискретный ряд:

$$E = \frac{h^2}{8\pi^2 m} \cdot \frac{n^2 \pi^2}{a^2} = \frac{h^2 n^2}{8ma^2}.$$

Иными словами, зоны возможных значений энергии электрона стягиваются в отдельные дискретные уровни энергии, что соответствует рассмотренному в теории Зоммерфельда случаю нахождения электрона в изолированной потенциальной яме шириной  $a$  и глубиной  $U_0 \rightarrow \infty$  изолированному электрону в ячейке кристаллической решетки.

## Практические задания по главе 1

### Практическая работа по теме

#### *«Нахождение спектра разрешенных значений энергий в прямоугольной квантовой яме с потенциальным барьером произвольной высоты»*

*Цель:* расчет зонной диаграммы для кристалла с учетом упрощений по теории Зоммерфельда и для структуры с заданным потенциальным барьером; построение распределения вероятности нахождения электрона в исследуемой области.

*Задание:*

1. Вычислить значения энергии частицы, находящейся в квантовой яме с бесконечными барьерами шириной  $L = 30 \text{ \AA}$  по формуле (16).
2. Построить волновую функцию  $\psi$  и квадрат модуля волновой функции  $|\psi|^2$  с использованием формулы (18).
3. Построить параметрическую зависимость энергии частицы от ширины квантовой ямы в диапазоне  $30\text{--}80 \text{ \AA}$ .
4. Рассчитать волновые функции и энергетический спектр в параметрической зависимости от ширины ямы и высоты барьера (рис. 3):  $\psi(z, V_1, V_2)$ ,  $E_n(d, V_1, V_2)$ , используя формулы (22) и (20). Рассмотреть частный случай  $V_1 = V_2 = 0.3$  (0.2, 0.4) эВ,  $d = 40, 60, 80, 100 \text{ \AA}$ .

### Вопросы для самоконтроля

1. Перечислите основные приближения, используемые в теории Зоммерфельда, для решения задачи о состояниях электронов в кристаллическом теле.
2. При каких условиях энергетические уровни в кристалле квантуются?
3. Каковы границы применимости теории Зоммерфельда?
4. При каких условиях состояния электронов являются вырожденными?

### Практическая работа по теме

#### *«Нахождение спектра разрешенных значений энергий в двойной квантовой яме»*

*Цель:* изучение способа решения уравнения Шредингера для модели связанных ям; построение волновых функций электрона.

*Задание:*

1. Рассчитать зонную диаграмму для туннельно-связанных ям и для структуры с заданным потенциальным барьером.
2. Построить распределение вероятности нахождения электрона в исследуемой области.
3. Оценить значения уровней энергии в симметричном потенциальном поле (рис. 4), если  $E \ll V_0$  и проницаемость барьера мала ( $\frac{2mV_0}{\hbar^2} b^2 \gg 1$ ), используя формулы (29) и (30), (примеч.: параметры  $a, b, m, V_0$  задаются преподавателем).
4. Построить волновые функции частицы, находящейся на основном уровне размерного квантования, используя формулы (31) и (32).
5. Построить волновые функции частицы в квантовой яме при  $b \rightarrow \infty$  (рис. 5).

### Вопросы для самоконтроля

1. Как изменится энергетический спектр частицы при переходе от модели структуры с одной квантовой ямой к структуре, состоящей из двух связанных ям?
2. Как изменится функция вероятности нахождения электрона в туннельно-связанных квантовых ямах, если приближение о малой проницаемости барьера не применимо?

## Практическая работа по теме

### «Расчет зонной диаграммы сверхрешеток на основе одномерной модели Кронига — Пенни»

*Цель:* расчет и построение энергетических минизон в сверхрешетках; выявление зависимости расположения минизон от различных параметров.

*Задание 1.* Построить зависимость положения энергетических уровней (минизон) от ширины квантовой ямы  $a$ . Параметр  $a$  варьируется от  $10 \div 100 \text{ \AA}$ , параметры  $b$  и  $U_0$  являются константами.

Этапы:

1) Построить зависимость  $f(x)$  по формуле (42). Прямые  $f(x)=1$  и  $-1$  (рис. 7).

2) Определить области разрешенных значений  $x_1$  и  $x_2$ , используя функции Mathcad.

Пример: найти решение уравнения  $y=x^3$ ,  $y=1$ ;  $x:=$ ,  $y:=$  (заданы начальные координаты точки, приближенные к области поиска решения уравнения).

Given

$x^3=1$  (= оператор глобального присвоения (булевы операторы))

$0 < x < 1$

$\begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} := \text{Find}(x, y) \quad \begin{pmatrix} x_0 \\ y_0 \end{pmatrix} =$

3) Определить значение энергии  $E_1=x_1U$ ,  $E_2=x_2U$ .

4) Изменить параметр  $a$  и вычислить значения энергии зон; выполнить пункты 1–3.

5) Из полученных данных создать массивы из значений  $a$  (ширина квантовой ямы),  $E_{11}$  (нижняя граница первой минизоны),  $E_{12}$  (верхняя граница первой минизоны),  $E_{21}$  (нижняя граница второй минизоны) и  $E_{22}$  (верхняя граница второй минизоны).

6) Построить зависимость  $E(a)$  для двух минизон.

*Задание 2.* Построить зависимость положения энергетических зон от ширины потенциального барьера  $b=20 \div 100 \text{ \AA}$ , выполняя последовательность пунктов 1–3 предыдущего задания. Ширину квантовой ямы и потенциального барьера считать постоянной  $1.1 \div 1.2 \text{ эВ}$ .

*Задание 3.* Построить зависимость положения энергетических зон от высоты потенциального барьера  $U_0=0.3 \div 0.6 \text{ эВ}$ . Геометрические параметры структуры считать постоянными.

### Вопросы для самоконтроля

1. Какой из недостатков теории Зоммерфельда учитывается моделью Кронига — Пенни?
2. Какова причина, обуславливающая образование зоны разрешенных значений энергий?
3. Какие допущения используются при решении уравнения Шредингера для электрона в кристаллической решетке в приближении сильно связанных электронов?
4. Дайте определение понятия «сверхрешетка». Почему модель Кронига — Пенни, используемая для решения задачи о состояниях электронов в кристаллической решетке, целесообразно использовать для нахождения энергетического спектра в сверхрешетке?

## Глава 2

# КИНЕТИКА ЭЛЕКТРОНОВ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СТРУКТУРАХ

### 2.1. Энергетический спектр частицы в полупроводнике

Особенности кинетических эффектов в полупроводниках во многом обусловлены энергетической структурой, степенью воздействия на нее внешних факторов (давление, электрическое и магнитное поле). Достоинством полупроводниковых соединений  $A^3B^5$  является их прямозонность — совпадение экстремумов зон проводимости и валентной зоны в точке  $k = 0$ , достаточно точное выполнение закона Кейна и изотропия эффективной массы. Далее нами приводятся основные соотношения между параметрами, характеризующими электроны в реальных полупроводниках и системах, с которыми адекватным образом могут быть сопоставлены описывающие их физические модели.

В объемном полупроводнике энергетический спектр  $\varepsilon(\vec{k})$  квазинепрерывен:

$$\varepsilon(\vec{k}) = \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2). \quad (43)$$

При отсутствии магнитного поля ( $B=0$ ) энергия Ферми  $\xi_{3D}$  связана с концентрацией объемных электронов соотношением

$$\xi_{3D} = \frac{\hbar^2}{2m^*} (3\pi^2 n)^{\frac{2}{3}}, \quad (44)$$

соответственно, фермиевский волновой вектор  $k_F$  определяется как

$$k_F = \sqrt[3]{3\pi^2 n}, \quad (k_F = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}). \quad (45)$$

Функция плотности состояний зависит от энергии  $\varepsilon$  по известному степенному закону:

$$g_{3D}(\varepsilon) = \frac{8\sqrt{2}}{(2\pi\hbar)^3} m^{*\frac{2}{3}} \varepsilon^{\frac{1}{2}}. \quad (46)$$

Если для движения электронов по одному направлению ( $z$ ) имеются ограничения (фиксированное значение энергии), то образуется двумерный электронный газ. Такое состояние может быть создано в полевых транзисторах и селективно легированных структурах (ГСЛ). Характерный вид сечения ГСЛ с 2D-электронами и вид зонной диаграммы представлен на рисунке 8 (а, б). Электроны заперты в квантовой яме поля  $E_z$ , созданного положительным зарядом ионизованных примесей в легированном слое  $n\text{-AlGaAs(Si)}$ , которые понижают потенциал электронов в направлении к поверхности раздела ( $z = 0$ ).

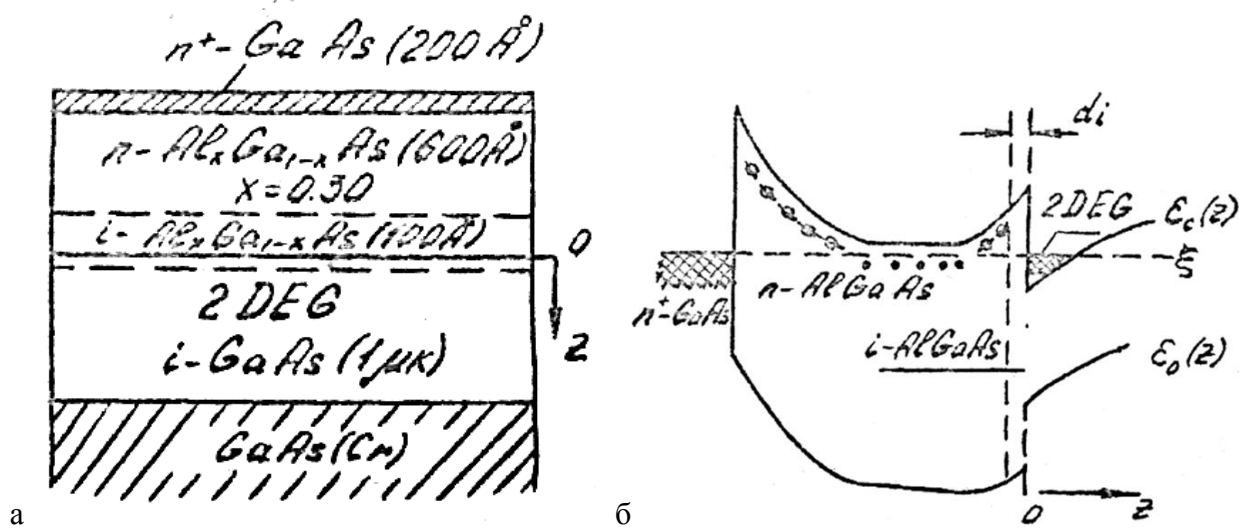


Рис 8. а) Вид сечения ГСЛ с 2D-электронами; б) вид зонной диаграммы

Если ширина потенциальной ямы мала по сравнению с длиной волны де Бройля электрона (на уровне Ферми), то энергия электронов группируется в электрические подзоны  $\varepsilon_j$ , соответствующие квантовым уровням для движения в направлении  $z$ . В низшем приближении для треугольного потенциала ( $z \geq 0$ ) с бесконечным барьером ( $z = 0$ ) электрические подзоны рассчитываются по формуле

$$\varepsilon_j = \frac{\hbar^2}{2m^*} \left( \frac{3}{2} \pi e E_z \right)^{\frac{2}{3}} \left( j + \frac{3}{4} \right)^{\frac{2}{3}}, \quad (47)$$

где  $j = 0, 1, 2, \dots$ . При низких температурах ( $T \approx 4, 2$  К) и малых плотностях 2D-электронов  $n_s$ , когда энергия Ферми, отсчитанная от нижней энергетической подзоны  $\varepsilon_0$ , мала по сравнению с  $\varepsilon_1 - \varepsilon_0$ , и равна

$$\xi_{2D} = \frac{\pi \hbar^2}{m^*} n_s, \quad (k_F^{2D} = \sqrt{2\pi n_s}), \quad (48)$$

2D-электроны занимают лишь нижнюю подзону и образуют строго двумерный газ с энергетическим спектром (электрический квантовый предел):

$$\varepsilon_{2D} = \varepsilon_0 + \frac{\hbar^2}{2m^*} (k_x^2 + k_y^2). \quad (49)$$

Плотность состояний  $g_{2D}(\varepsilon)$  — ступенчатая функция энергии

$$g_{2D} = \frac{m^*}{\pi \hbar^2}. \quad (50)$$

Трансформация поверхности Ферми (сферы для 3D-случая) с понижением размерности в круг показана на рисунке 9а, а качественный вид функции плотности состояний для 2D и 3D-электронов — на рисунке 9б.

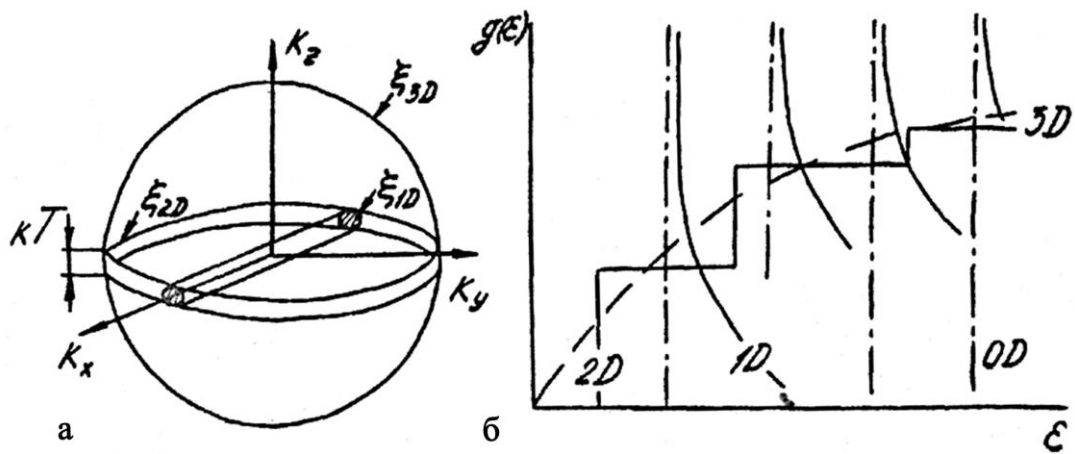


Рис. 9. а) поверхности Ферми; б) функции плотности состояний электронов в состоянии 3D, 2D и 1D (в и г). Условные обозначения: GaAs(Cr) — подложка; i-GaAs — буферный слой; i-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As — спейсер толщиной d; n-Al<sub>x</sub>Ga<sub>1-x</sub>As — легированный слой; n<sup>+</sup>-GaAs — контактный слой;  $\xi_{3D}$ ,  $\xi_{2D}$ ,  $\xi_{1D}$  — поверхность Ферми;  $kT$  — тепловое уширение.

Понижение размерности (ограничение степеней свободы по  $y$  и  $z$ ) до 1D-состояния приводит к поверхности Ферми в виде длинного цилиндра почти  $\delta$ -образного вида  $g_{1D}(\epsilon)$ . В магнитном поле  $B(0,0,B_z)$  энергетический спектр (1) квантуется как

$$\epsilon = \frac{p_z^2}{2m^*} + \hbar\omega \left( N + \frac{1}{2} \right), \quad (51)$$

где  $p_z = \hbar k_z$ ,  $\omega = \frac{e}{2m^*} B$  — циклотронная частота,  $N = 0, 1, 2, \dots$  — номер магнитной подзоны Ландау.

В этих условиях  $\epsilon(k_z)$  имеет вид эквидистантно (с зазором  $\hbar\omega$ ) расположенной серии магнитных подзон Ландау, что иллюстрируется на рисунке 10а для энергий и рисунке 10б — для функции плотности состояний  $g(\epsilon)$ . Аналогичная картина возникает и для 2D-электронов (рис. 10 в, г). Однако квантование наблюдается при определенных физических условиях.

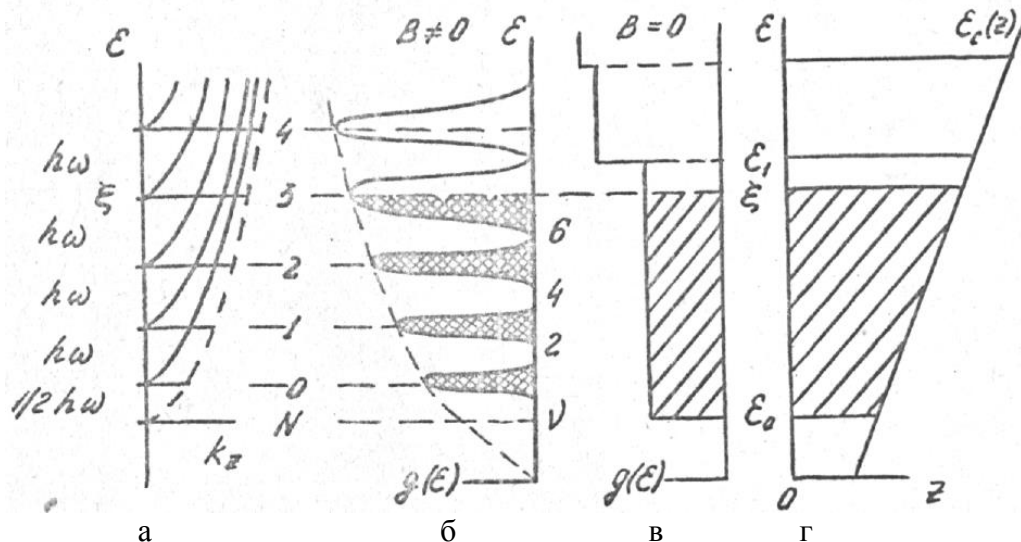


Рис. 10. Вид закона дисперсии: а)  $\epsilon(k_z)$  для объемных 3D-электронов; б)  $g(\epsilon)$  — для объемных 3D-электронов; в) для двумерных электронов в отсутствие магнитного поля; г) для двумерных электронов в магнитном поле. Условные обозначения:  $\hbar\omega$  — энергия магнитного кванта;  $N$  — номера подзон Ландау;  $\nu$  — числа заполнения;  $\epsilon_{0,1,2}$  — уровни энергии пространственного квантования.



В зависимости от температуры опыта  $T$ , величины подвижности электронов  $\mu$ , энергии Ферми  $\xi$  (концентрации электронов  $n$ ) весь диапазон магнитных полей  $B$  (с точки зрения физического воздействия на электронные явления) разделяют на области:

$$\text{классические слабые:} \quad \mu B \ll 1, \omega \tau_t \ll 1, \hbar \omega \ll kT, \quad (52.1)$$

$$\text{классические сильные:} \quad \mu B \gg 1, \omega \tau_t \gg 1, \hbar \omega \ll kT, \quad (52.2)$$

$$\text{квантовые:} \quad \mu B \gg 1, \omega \tau_t \gg 1, \hbar \omega \gg kT, \quad (52.3)$$

$$\text{осцилляции Шубникова — де Гааза:} \quad \mu B \gg 1, \omega \tau_t \gg 1, \hbar \omega \gg kT, \xi > \hbar \omega, \quad (52.4)$$

$$\text{квантовый предел:} \quad \mu B \gg 1, \omega \tau_t \gg 1, \hbar \omega \gg kT, \xi < \frac{\hbar \omega}{2}, \quad (52.5)$$

где  $\tau_t$  — время релаксации импульса электронов (транспортное время). Условие (52.4) предполагает наличие вырождения электронов, которое может быть снято магнитным полем в квантовом пределе (52.5).

## 2.2. Квантовое и классическое время релаксации

В литературе упоминается терминология классического и квантового времени релаксации. Время  $\tau_t$  определяет транспортную подвижность  $\mu$  и, соответственно, проводимость  $\sigma$ :

$$\mu = \left( \frac{e}{m^*} \right) \tau_t \quad (a), \quad \sigma = ne\mu \quad (b). \quad (53)$$

*Транспортное, или классическое время* — это время жизни частицы на длине свободного пробега, которое выражается через интеграл столкновений:

$$\tau_t^{-1} \sim \int \sigma(\theta)(1 - \cos \theta) d\theta, \quad (54)$$

где  $\theta$  — угол рассеяния,  $\sigma(\theta)$  — сечение рассеяния. Угол рассеяния  $\theta$  из-за множителя  $(1 - \cos \theta)$  учитывает лишь рассеяние с большим изменением импульса, или большеугловое рассеяние. Экспериментально величина определяется путем измерения постоянной Холла  $R_H$  и проводимости  $\sigma$  в классически слабом магнитном поле, когда зависимость напряжения Холла от магнитного поля  $B$  линейная, а  $R_H$ ,  $\mu$  от  $B$  не зависят.

Время  $\tau_q$  характеризует затухание квантования Ландау, то есть разрушение циклотронных орбит:

$$\tau_q^{-1} \sim \int \sigma(\theta) d\theta. \quad (55)$$

Подынтегральная функция не содержит множителя  $(1 - \cos \theta)$ , следовательно, в  $\tau_q$  включены процессы столкновений с малым изменением импульса — малоугловое рассеяние.  $\tau_q$  измеряется из магнитолевой зависимости амплитуды квантовых осцилляций по температуре Дингла (56) — это фактор, формально учитывающий нетепловое уширение уровней Ландау:

$$T_D = \frac{\hbar}{2\pi k \tau_q}, \quad (a) \quad (56.1)$$

$$R_D = \exp\left(\frac{-2\pi^2 k T_D}{\hbar \omega_c}\right), \quad (56.2)$$

где  $R_D$  — понижающий фактор Дингла,  $\omega_c = \frac{e}{m^*} B$  — циклотронная частота. По причине того, что  $\tau_q$  измеряется в области квантующих магнитных полей, этот кинетический параметр называют квантовым временем релаксации.

Так как величины  $\tau_q$  и  $\tau_t$  по существу соответствуют различным условиям, при которых происходит рассеяние носителей тока, то соотношение их может быть разным по величине. В частности, при доминирующем рассеянии на ионизированных примесях времена релаксации  $\tau_0$  и  $\tau_q$  связаны соотношением

$$\tau_t \simeq \left( \frac{\varepsilon_F}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} \tau_q^{\frac{3}{2}}. \quad (57)$$

### 2.3. Физическая природа осцилляций Шубникова — де Гааза

Теория явлений переноса безотносительно к степени размерности электронов (3D, 2D) сформулирована в терминах компонент тензоров магнитосопротивления и проводимости. Для внешних условий  $B(0, 0, B_z)$ ,  $E(E_x, E_y, 0)$  и  $j(j_x, 0, 0)$  соотношения между компонентами имеют вид

$$\rho_{xx} = \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2}, \quad \rho_{xy} = \frac{-\sigma_{xy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2}. \quad (58)$$

При наличии вырождения, когда под уровнем Ферми  $\xi$  находится несколько подзон Ландау, и при условии небольшого теплового столкновительного уширения уровней Ферми и Ландау ( $\xi > kT$ ,  $\hbar\omega > kT$ ) всякий раз, как только  $N$ -уровень Ландау пересекает уровень Ферми, то есть в условиях (59)

$$\xi = \hbar\omega \left( N + \frac{1}{2} \right), \quad (59)$$

имеют место резонансы кинетических эффектов осцилляции Шубникова — де Гааза.

Осцилляции проявляются на фоне монотонных компонент соответствующих кинетических коэффициентов. Период осцилляции  $\Delta(1/B)$  определяется концентрацией электронов:

$$\text{а) для 3D-электронов } -\Delta\left(\frac{1}{B}\right) = \frac{2e}{\hbar} \left(3\pi^2 n\right)^{-\frac{2}{3}}, \quad (60.1)$$

$$\text{б) для 2D-электронов } -\Delta\left(\frac{1}{B}\right) = \frac{e(\pi\hbar)^{-1}}{n_s}. \quad (60.2)$$

Эффекты квантования Ландау (осцилляции магнитной восприимчивости ван Альфена — де Гааза, магнитосопротивления Шубникова — де Гааза, ЭДС ФЭМ<sup>1</sup> Кикоина — Носкова и др.) являются наиболее распространенным и информационным методом получения ценной информации об объектах исследований. В нашем случае в качестве источника информации выступают осцилляции магнитосопротивления Шубникова — де Гааза.

Для исследования параметров квантовых ям в гетероструктурах широко используются измерения компонент  $\rho_{xx}$  и  $\rho_{xy}$  магнитосопротивления, поскольку с помощью подобных измерений удобно зондировать осциллирующую плотность состояний на уровне Ферми, определяющую рассеяние электронов. Для типичной холловской конфигурации, когда ток течет в

<sup>1</sup> Электродвижущая сила фотоэлектромагнитного эффекта.

направлении  $x$ , а сильное магнитное поле приложено в направлении  $z$ , компонента проводимости  $\sigma_{xy}$  обычно значительно больше, чем  $\sigma_{xx}$ . Поскольку рассеяние электронов максимально при совпадении  $E_F$  с уровнем Ландау, зависимость магнитосопротивления от  $B$  испытывает осцилляции, известные как осцилляции Шубникова — де Гааза.

## 2.4. Методы исследования осцилляций Шубникова — де Гааза

Исследование гетероструктур с двумерным и квазидвумерным электронным газом может осуществляться по отклику данной структуры на внешнее воздействие. Так, например, при помещении структуры в магнитное поле изменяется характер движения электронов, а энергетический спектр квантуется. Квантование энергии приводит к перераспределению плотности состояний, ее осцилляциям на уровнях. Максимумы плотности состояний наблюдаются на уровнях Ландау. Следовательно, можно наблюдать изменение основных параметров, характеризующих структуру, таких как магнитосопротивление, проводимость, магнитовосприимчивость. Полученные особенности поведения данных величин позволяют оценить не только основные параметры зонной диаграммы структуры ( $E_F$ ,  $E_c$ ,  $E_v$ ), но и величины, характеризующие двумерный электронный газ (подвижность, концентрацию, основные и комбинированные частоты, время релаксации, температуру Дингла). При определенных физических условиях можно наблюдать осцилляции продольного и поперечного магнитосопротивления при изменении магнитного поля — осцилляции Шубникова — де Гааза.

Для исследования экспериментальных кривых  $\rho(B)$  применяются различные методы, наиболее информативные из которых — метод графического анализа и метод Фурье. Эти методы независимы и дают результаты, которые хорошо согласуются с данными других авторов.

Метод графического анализа позволяет определить параметры структуры с вырожденным электронным газом ( $\omega_c$ ,  $n_s$ ,  $E_F$ ,  $T_D$  и  $\gamma$ ) с помощью построения графиков Дингла и верных диаграмм.

**Первый этап исследования** поведения 2D-электронного газа заключается в получении основных характеристик ( $n_s$ ,  $\Delta$ ,  $E_F$ ). Экспериментальные зависимости поперечного магнитосопротивления в магнитном поле  $\rho(B)$  представлены на рисунке 11.

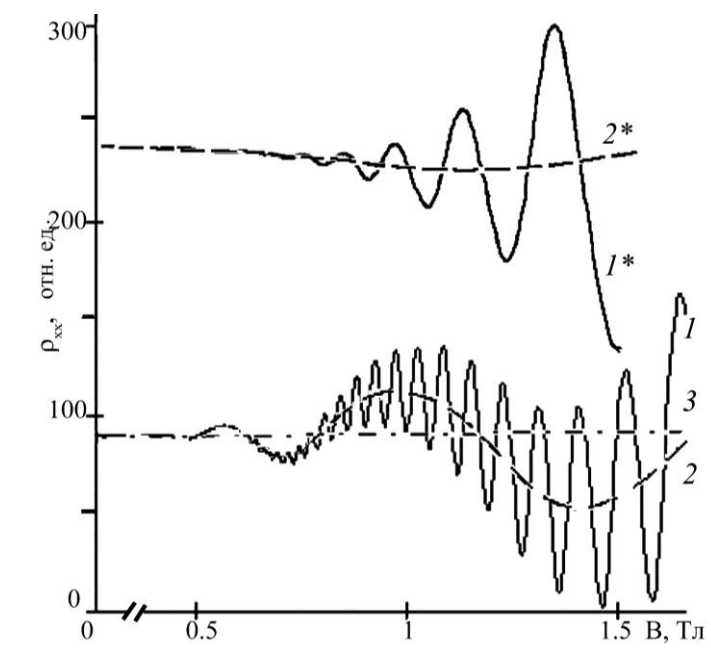


Рис. 11. Осцилляции поперечного магнитосопротивления для структуры с одной (1\*), двумя (1) заполненными подзонами. Условные обозначения: 1, 1\* — основные осцилляции; 2, 2\* — выделенная гармоника; 3 — монотонная компонента.

Обработка данных начинается с оцифровки экспериментальной кривой при помощи математических пакетов программ в среде Mathcad. Данная операция позволяет получить массивы, состоящие из набора величин  $\rho$  (Ом) и  $B$  (Тл), необходимых для дальнейшего нахождения искомых параметров. Далее строится зависимость магнитосопротивления в обратном магнитном поле  $\rho\left(\frac{1}{B}\right)$  (рис. 12).

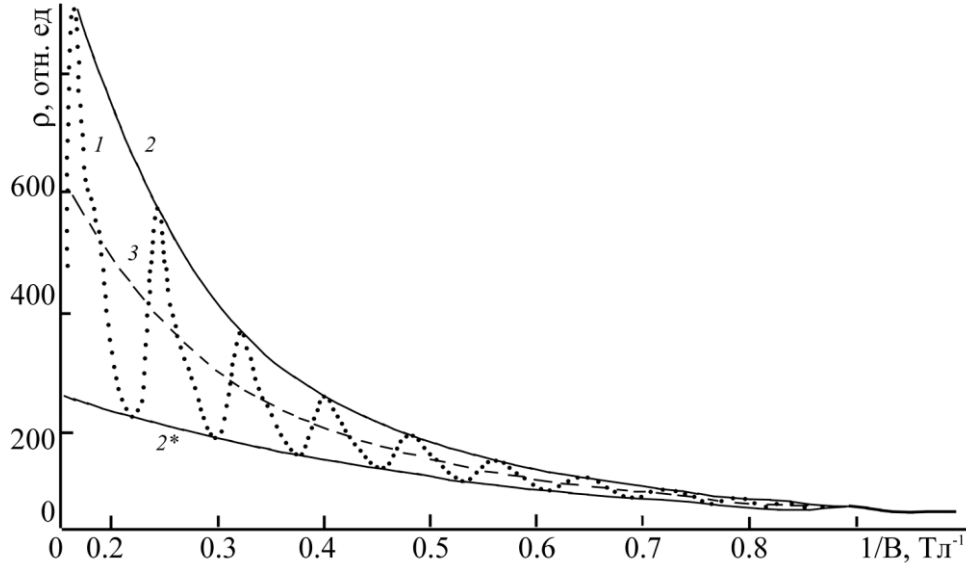


Рис. 12. Осцилляции поперечного магнитосопротивления в обратном магнитном поле для структуры с одной заполненной подзоной. Условные обозначения: 1 — исходная осцилляционная кривая; 2, 2\* — огибающие; 3 — монотонный компонент.

Приведение графика  $\rho(B)$  к виду  $\rho\left(\frac{1}{B}\right)$  позволяет определить период осцилляций как расстояние между двумя соседними экстремумами (максимумами или минимумами) в обратном магнитном поле. Для повышения точности оцениваемой величины было учтено положение всех экстремумов, а период осцилляций ( $\Delta_{осц}$ ) был получен с использованием следующего соотношения:

$$\Delta_{осц} = \frac{1}{n-1} \left( \frac{1}{B_n} - \frac{1}{B_1} \right), \quad (61)$$

где  $n$  — порядковый номер максимума или минимума.

Период осцилляций  $\Delta_{осц} = \frac{1}{B}$  в обратном магнитном поле позволяет определить концентрацию 2D-электронного газа. Взаимосвязь этих величин получена из следующих соображений.

Теоретически осцилляции поперечного магнитосопротивления описываются соотношением

$$\frac{\Delta\rho}{\rho_0} \sim \frac{\beta T}{B} \frac{1}{\text{sh}\left(\frac{\beta T}{B}\right)} \exp\left(\frac{-\beta T_D}{B}\right) \cos\left(\frac{2\pi m^* E_F}{\hbar e B} - \gamma\right), \quad (62)$$

где  $\beta = \frac{2\pi^2 km^*}{\hbar q_e}$ ,  $\Delta\rho$  — осциллирующая часть  $\rho_{xx}$ ,  $\rho_0$  — монотонная часть осцилляций  $\rho_{xx}$ ,  $m^*$  — эффективная масса электрона,  $e$  — заряд электрона,  $E_F$  — энергия Ферми,  $\gamma$  — фаза,  $\hbar$  — постоянная Планка,  $B$  — индукция магнитного поля,  $T_D$  — фактор, учитывающий нетепловое уширение уровней Ландау.

Зависимость  $\frac{\Delta\rho}{\rho}(B)$  — гармоническая затухающая функция. Частота осцилляций, с одной стороны, определяется из выражения, стоящего под косинусом (62)

$$\omega_{осц} = \frac{2\pi m^* E_F}{\hbar e} = \frac{2\pi^2 \hbar}{e} n_s = \frac{\pi \hbar}{e} n_s, \quad (63)$$

где  $n_s$  — концентрация электронов в подзоне размерного квантования; с другой стороны, частота связана с периодом осцилляций известным соотношением

$$\omega_{осц} = \frac{2\pi}{\Delta_{осц}}. \quad (64)$$

Таким образом, приравнивая выражения (63) и (64), можно определить концентрацию 2D-электронного газа в каждой подзоне размерного квантования:

$$n_s = \frac{e}{\pi \hbar} \frac{1}{\Delta_{осц}}. \quad (65)$$

Полученные результаты позволяют определить значение энергии уровня Ферми благодаря следующему соотношению:

$$E_F = \frac{\pi \hbar^2}{m^*} n_s^*, \quad (66)$$

где  $n_s^*$  — общая концентрация носителей в подзонах.

**Второй этап исследования** вырожденного электронного газа направлен на идентификацию экстремумов осцилляций (определение номера Ландау для каждой подзоны). Условие максимума осцилляций  $\frac{\Delta\rho}{\rho}(B)$  можно записать в виде

$$E_F = \left(N + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c = \left(\frac{\hbar e}{m^*}\right) B_N \left(N + \frac{1}{2}\right), \quad (67)$$

где  $\omega_c$  — циклотронная частота,  $B_N$  — значение индукции магнитного поля, соответствующее максимуму,  $N$  — целое число (номер подзоны Ландау и, соответственно, максимума осцилляций). Используя формулу (65), получим следующее соотношение:

$$N = \frac{1}{\Delta_{осц}} \frac{1}{2}. \quad (68)$$

Результаты идентификации осцилляционных экстремумов представлены в виде графика  $\left(\frac{1}{B}\right) = f(N)$  (веерной диаграммы) (рис. 13).

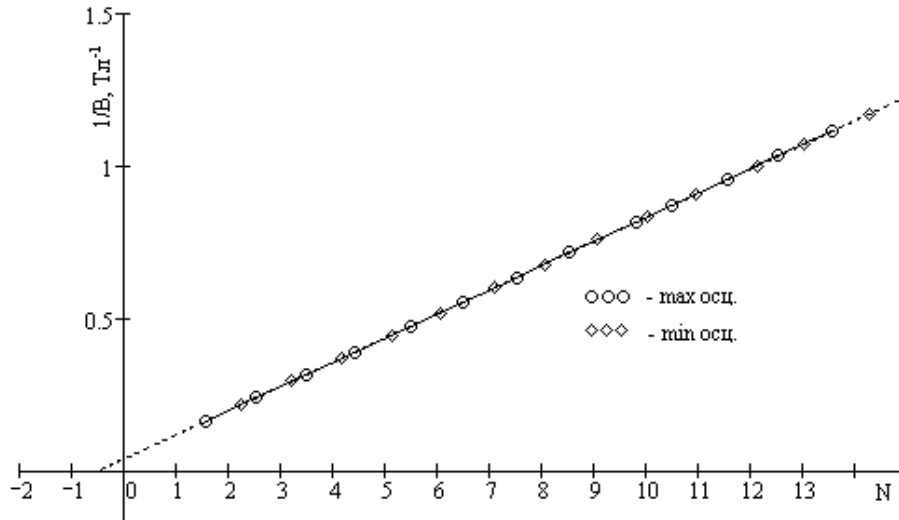


Рис. 13. Веерная диаграмма

Наклон веерной диаграммы определяется периодом осцилляций  $\Delta_{осц}$ . Используя зависимость положения экстремумов в обратном магнитном поле от положения подзон квантования Ландау, можно оценить и концентрацию. Связь величин устанавливается известным соотношением (65). Фаза  $\gamma$  определяется по отклонению  $N$  (квантового номера Ландау), соответствующего  $\frac{1}{B_N}$ , от целого числа. Величина и знак фазы находятся по пересечению прямой  $\left(\frac{1}{B}\right) = f(N)$  с осью абсцисс с применением уравнения

$$\gamma = (2i + 0.5)\pi, \quad (69)$$

где  $i$  — точка пересечения с осью абсцисс.

**Третий этап исследования** вырожденного электронного газа состоит в установлении природы нетеплового (столкновительного) уширения уровней Ландау.

Параметр, учитывающий затухание осцилляций и связанный со столкновительным уширением уровней (взаимодействием между электронами), называется *температурой Дингла* ( $T_D$ ).

Оценки температуры Дингла выполняются по магнитолевой зависимости нормированной амплитуды осцилляций  $\delta\left(\frac{1}{B}\right)$  при  $T=const$  (рис. 14).

Прологарифмировав уравнение (62), получим выражение

$$\ln\left(\delta_N \frac{\text{sh}(x)}{x}\right) = -\frac{\beta T_D}{B_N} + const, \quad (70)$$

где  $x = \frac{\beta T}{B}$ ,  $\delta_N$  — амплитуда максимумов или минимумов осцилляций с номером  $N$ , а  $B_N$  — соответствующее магнитное поле. Используя соотношение (57), строим график Дингла (рис. 14),

где по оси абсцисс откладываем величины  $\left(\frac{1}{B}\right)$ , соответствующие максимуму и минимуму осцилляций, по оси ординат — величины  $\ln \delta = \ln\left(\delta_N \frac{\text{sh}(x)}{x}\right)$ , соответствующие максимуму и минимуму. Так как температура Дингла определяется по наклону зависимости  $\ln \delta\left(\frac{1}{B}\right)$ , необходимо аппроксимировать ее прямой.

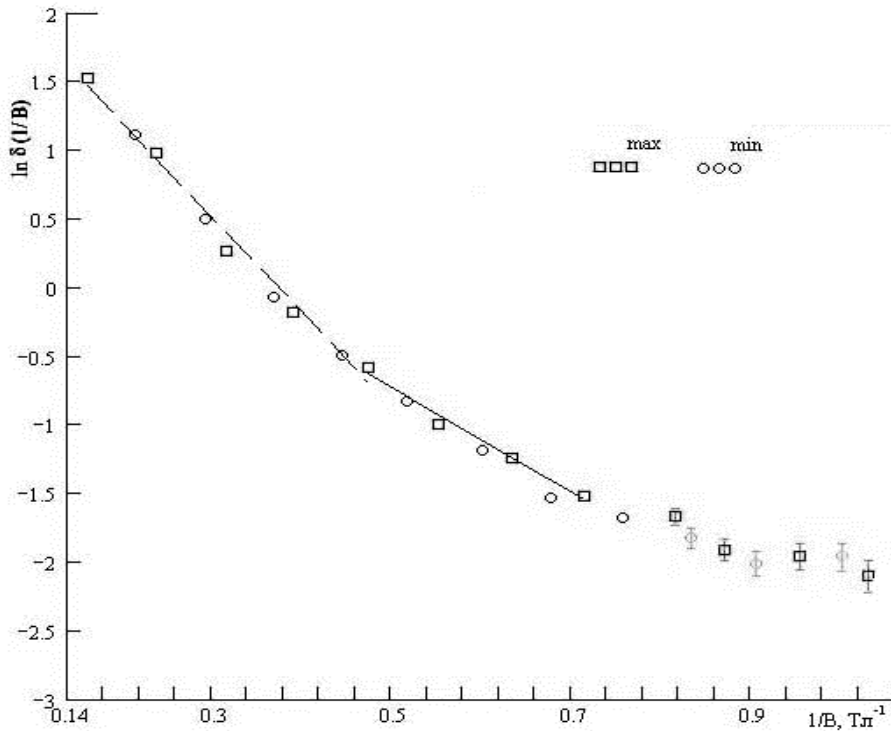


Рис. 14. Магнитополевая зависимость логарифма нормированной амплитуды осцилляций (график Дингла)

Функции аппроксимации графиков содержатся в любых прикладных математических пакетах. Разберем возможные способы построения аппроксимирующей прямой.

Уравнение прямой имеет вид  $r(x) = b_1 \cdot x + b_0$ .

Коэффициенты можно вычислить двумя способами:

1) с помощью встроенных функций Mathcad:

$$b_0 := \text{intercept}(X, YD) \quad b_0 =$$

$$b_1 := \text{slope}(X, YD) \quad b_1 =$$

$$r(x) := b_0 + b_1 x$$

(71)

2) методом наименьших квадратов:

$$b_1 = \frac{N \sum_i x_i y_i - \sum_i x_i \sum_i y_i}{N \sum_i x_i^2 - \left(\sum_i x_i\right)^2}, \quad b_0 = \frac{\sum_i x_i^2 \sum_i y_i - \sum_i x_i \sum_i x_i y_i}{N \sum_i x_i^2 - \left(\sum_i x_i\right)^2}.$$

Следовательно, температура Дингла определяется соотношением  $T_D = \frac{-b_1}{\beta}$ .

С помощью построения магнитополевой зависимости амплитуды  $\delta\left(\frac{1}{B}\right)$  можно получить  $T_D$  и  $\tau_q$  — одночастичное время релаксации, используя следующее соотношение:

$$T_D = \frac{\hbar}{2\pi k \tau_q}. \quad (72)$$

Время релаксации позволяет судить о механизмах рассеяния. Так, в случае заполнения одной подзоны ожидается, что  $\tau_q \sim 10^{-13}$  с, а в случае заполнения двух подзон ожидается интермодуляция амплитуды  $\delta\left(\frac{1}{B}\right)$  и зависимость  $\tau_q$  от магнитного поля как результат проявления межподзонного рассеяния и рассеяния на фононах.

## 2.5. Эффект Холла

В 1879 году Эдвин Герберт Холл открыл эффект, состоящий в том, что в проводнике с током, помещенном в магнитное поле, перпендикулярное направлению тока, возникает электрическое поле в направлении, перпендикулярном направлениям тока и магнитного поля. Данное электрическое поле, называемое *полем Холла*, вызвано действием силы Лоренца, заставляющей электроны отклоняться в направлении, перпендикулярном скорости  $v$ . В результате это поле  $E_H$  уравнивает силу Лоренца, и между боковыми гранями образца возникнет разность потенциалов  $V_H$ , которая поддается измерению.

Рассмотрим обычный проводник (или полупроводник) (рис. 15), имеющий форму прямоугольного параллелепипеда с размерами  $l \times a \times b$ . Пусть через него течет ток  $I$  в направлении оси  $x$ , тогда средняя скорость электронов в этом направлении равна  $v$ . На электроны, движущиеся в магнитном поле, действует сила Лоренца  $F_L$ , которая определяется по формуле  $F_L = eBv$ , где  $v = \frac{I}{neS}$ ,  $n$  — концентрация электронов,  $S$  — площадь поперечного сечения.

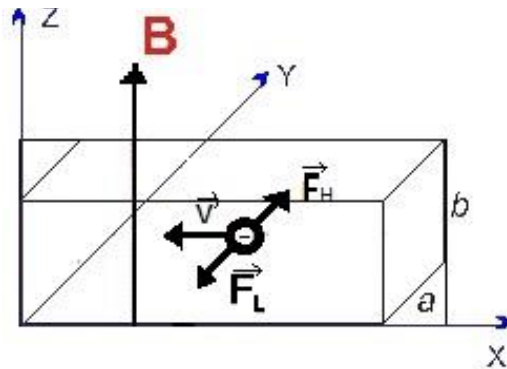


Рис. 15. Иллюстрация эффекта Холла

Сила Лоренца заставляет электроны двигаться по окружности, при этом изменяется направление их скорости. Для того чтобы в каком-либо направлении (например, ОХ) средняя скорость электронов была не равна нулю, необходимо, чтобы вдоль оси ОУ действовала дополнительная сила, которая бы уравнивала силу Лоренца. Такой силой оказывается электростатическая сила  $F_H$ , действующая на электроны со стороны поля Холла. Сила  $F_H$  возникает в тот момент, когда мы включаем ток через канал. Прикладывая внешнее электрическое поле в направлении ОХ, а магнитное — вдоль оси ОZ, электрон попадает в скрещенные поля и движется в направлении, перпендикулярном им обоим, то есть в направлении ОУ. В момент включения полей ток потечет вдоль оси Y, но это быстро прекратится, как только носи-



тели заряда достигнут границы проводника. Ток станет равным нулю, как только распределение электронов по оси  $Y$  изменится достаточно, чтобы возникло электрическое поле, препятствующее их дальнейшему смещению:  $F_H = F_L$ . В результате вдоль направления  $OY$  возникнет разность потенциалов, равная  $U_H = E_H \cdot a$ , где  $E_H = \frac{F_L}{e}$ .

Обозначив отношение холловской, поперечной разности потенциалов к протекающему продольному току  $R_H$ , получим:

$$R_H = \frac{U_H}{I} = \frac{B}{neb}$$

При этом продольное сопротивление обычно слабо зависит от индукции магнитного поля, оставаясь по величине близким к своему значению при  $B = 0$ .

## 2.6. Квантовый эффект Холла

Впервые квантовый (целочисленный) эффект Холла был обнаружен К. фон Клитцингом в 1980 году при исследовании полупроводниковых структур на основе оксида кремния с двумерным электронным газом. Клитцинг обнаружил, что в двумерном электронном слое зависимости  $R_H$  от  $B$  и  $n$  перестают быть плавными. Дробный квантовый эффект получен в 1982 году Д. Тсуи и А. Госсардом в двумерном электронном газе в гетероструктурах GaAs-AlGaAs. Этот эффект проявляется в виде аномальной зависимости поперечного магнитосопротивления от магнитного поля  $\rho_{xy}(B)$  и на зависимости холловского сопротивления от магнитного поля  $R_H(B)$ . В процессе наблюдения были обнаружены плато на данных зависимостях, причем значения сопротивления в этих областях выражаются лишь фундаментальными постоянными и целым числом  $\nu$ :  $R_H = \frac{h}{\nu e^2}$ .

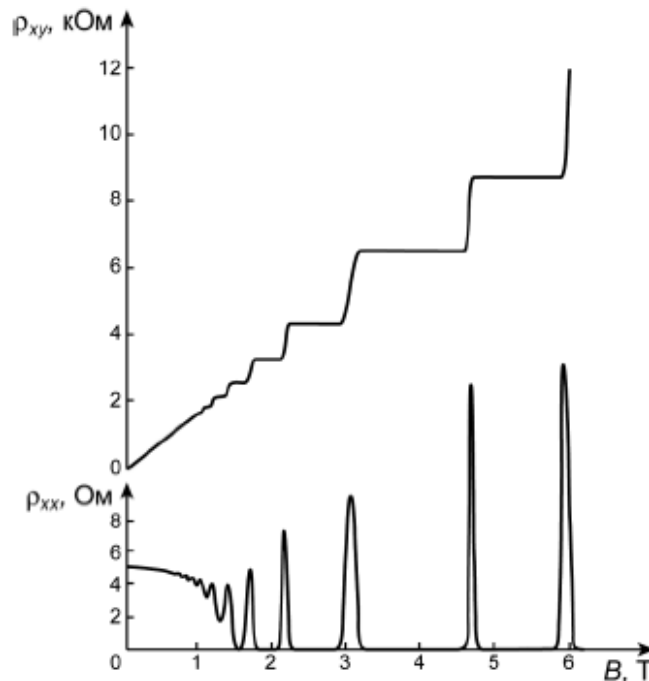


Рис. 16. Зависимость поперечного магнитосопротивления  $\rho_{xx}(B)$  и сопротивления Холла  $\rho_{xy}(B)$

Теоретическое описание целочисленного и дробного квантового эффекта Холла изучаются по отдельности. Причина такого искусственного разделения связана с тем, что целочисленный эффект Холла возникает в сильном магнитном поле при рассмотрении модели невзаимодействующих двумерных электронов в случайном потенциале. В рамках этой упрощенной модели взаимодействия для невзаимодействующих электронов теоретическое описание сводится к решению задачи о движении двумерного электрона в случайном потенциале при наличии сильного перпендикулярного магнитного поля. Эта задача о движении называется *задачей локализации Андерсона*. Учет влияния электрон-электронного взаимодействия возможен путем введения поправок.

Теория дробного квантового эффекта Холла должна учитывать одновременно наличие сильного магнитного поля, случайный потенциал, создаваемый примесями, и (обязательно) электрон-электронное взаимодействие, так как взаимодействие между электронами приводит к ряду качественных изменений в кинетике заряженных частиц. Теория должна адекватно описывать отклик двумерной электронной системы на приложенное внешнее электромагнитное поле.

Для наблюдения квантового эффекта Холла необходимо в полупроводниковой гетеросистеме создать двумерный электронный газ, ограничивая движение электронов по одному из направлений, и физические условия для квантования энергии частиц.

## 2.7. Методы создания двумерного электронного газа

### *Двумерный электронный слой в кремниевом МОП-транзисторе*

Устройство МОП-транзистора (металлоокисный проводник транзистора) схематически изображено на рисунке 17. Когда на металлический затвор из алюминия (Al) подается положительное напряжение, то, так же, как и в конденсаторе (роль изоляционной прослойки играет оксид кремния ( $\text{SiO}_2$ )), из объема кремния (Si), который является полупроводником p-типа, притягивается отрицательный заряд. За счет изгиба зон, вызванного потенциалом на границе раздела, электроны из валентной зоны, притянутые к поверхности, сначала заполняют связанные состояния на акцепторных примесях, так как энергетические уровни находятся в запрещенной зоне вблизи валентной зоны. В дальнейшем электроны попадают на дискретный уровень в зоне проводимости, создавая, таким образом, двумерный электронный газ. Меняя потенциал затвора, можно регулировать двумерную концентрацию электронов в широких пределах.

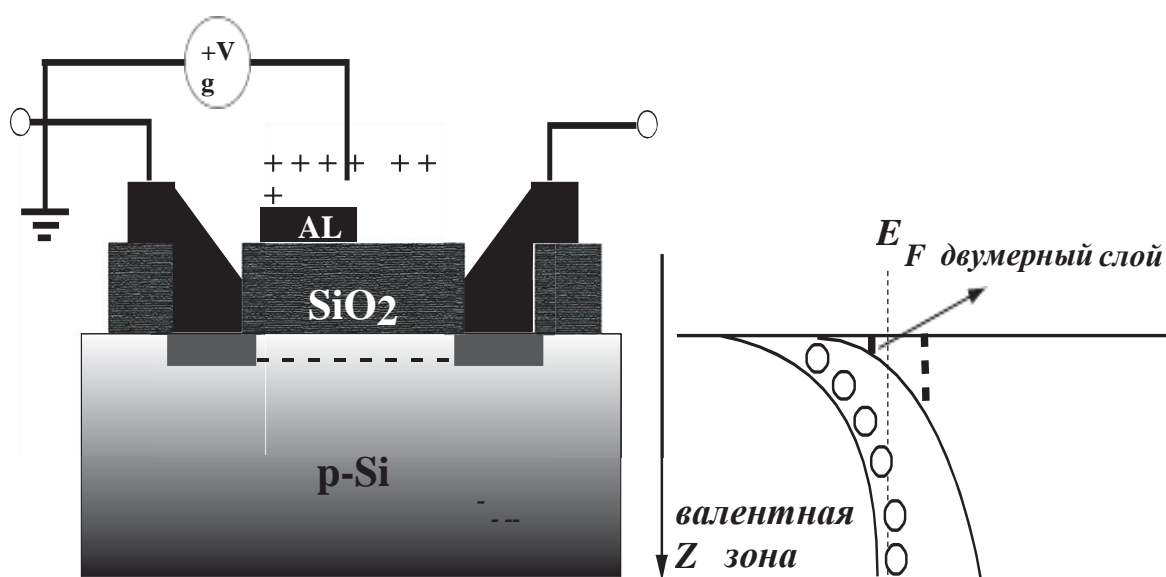


Рис. 17. Схемы кремниевых МОП-транзистора (вид сбоку) и энергетических зон

### Создание инверсионного слоя

Инверсионный слой может быть создан на границе раздела двух полупроводников с разной шириной запрещенной зоны. Возьмем легированный полупроводник n-типа, например, AlGaAs, и полупроводник p-типа, например, GaAs, который играет роль изолятора (рис. 18). Ширина запрещенной зоны в GaAs почти в два раза меньше, чем в AlGaAs. Это позволяет электронам в AlGaAs покинуть свои места на донорных примесях и, туннелируя через барьер, который создается нелегированным полупроводником n-типа, попасть либо на акцепторные примеси в запрещенной зоне над валентной зоной GaAs, либо в зону проводимости. Положительный заряд донорных примесей притягивает электроны, протуннелировавшие в GaAs, к границе раздела двух полупроводников, что приводит к искривлению зон и появлению дискретного уровня вблизи этой границы. Затем уровни Ферми выравниваются, и приток электронов из AlGaAs прекращается, дискретный уровень опускается ниже уровня Ферми и оказывается заселенным электронами, движение которых ограничено двумя пространственными измерениями.

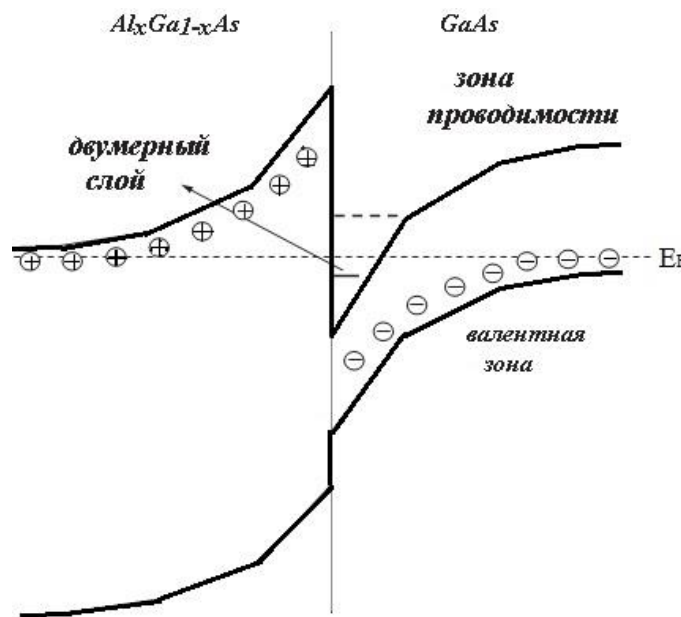


Рис. 18. Схема энергетических зон в AlGaAs/GaAs

### 2.8. Условия квантования энергетического спектра электронов

Как уже отмечалось ранее, в двумерном электронном газе энергия по одному направлению может принимать лишь фиксированные значения. В то же время, наличие магнитного поля приводит к тому, что и по остальным двум направлениям энергия перестает меняться непрерывно. Таким образом, в двумерном электронном газе в магнитном поле полная энергия электрона может принимать лишь некоторые фиксированные значения.

Точное решение уравнения Шредингера для двумерного электронного газа с одной заполненной подзоной размерного квантования дает следующие значения энергии:

$$E_F = E_0 + \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega \pm \frac{1}{2} g\mu_B B, \quad (73)$$

где  $E_0$  — энергия нижней подзоны размерного квантования,  $g$  — фактор Ланде,  $\mu_B$  — магнетон Бора. Последний член описывает спиновое расщепление уровней Ландау.

На каждом уровне Ландау, когда электроны будут иметь одну и ту же энергию может находиться лишь определенное число электронов (на единицу площади образца). Это число называется *кратностью вырождения* и не зависит от номера уровня Ландау, от эффективной массы электрона, а определяется лишь мировыми константами и величиной магнитного поля. Эта величина равна

$$N_H = \frac{eB}{h}. \quad (74)$$

Отношение концентрации носителей к кратности вырождения называется *фактором заполнения*. Фактор заполнения показывает, какое количество уровней Ландау заполнено электронами при данной концентрации в заданном магнитном поле. Целый фактор заполнения означает, что какое-то число уровней Ландау полностью заполнено, а вышележащие энергетические уровни пусты.

Следует отметить, что расщепление энергетического уровня размерного квантования на подуровни Ландау возможно только при наличии условия квантующего магнитного поля, когда магнитное поле заставляет двигаться электроны по циклотронным орбитам, и при низких температурах. Должны выполняться условия  $\mu B \gg 1$ ,  $\omega\tau \gg 1$ ,  $\hbar\omega \gg kT$ ,  $\xi > \hbar\omega$ .

Экспериментальная зависимость продольного и поперечного магнитосопротивления от магнитного поля представлена на рисунке 16.

Продольное же сопротивление  $\rho_{xx}$  (отношение падения напряжения вдоль направления тока к величине этого тока) при некоторых значениях магнитного поля обращается в нуль.

Электрическое сопротивление возникает из-за рассеяния электронов на потенциале, созданном примесями и дефектами решетки. При рассеянии электрон отклоняется от первоначального направления движения, изменяет свою скорость, из-за чего изменится и вклад в ток, в проводимость.

Если уровень Ландау заполнен частично и есть свободные места, то будет происходить малоугловое рассеяние в пределах одного энергетического уровня без существенного изменения энергии электрона. Если же уровень Ландау заполнен полностью и вакантные места отсутствуют, то электрон не может изменить своего положения относительно других электронов, и тогда будет наблюдаться рассеяние с изменением импульса при переходе на незаполненный уровень Ландау. Вероятность таких переходов определяется температурой  $\sim e^{-\frac{\hbar e B}{2kTm^*}}$ . При низких температурах она достаточно мала.

$$n = \nu N_H = \nu \frac{eB}{h}. \quad (75)$$

Таким образом, при  $T = 0$  и при целом факторе заполнения  $\nu$  продольное сопротивление обращается в нуль. Это означает, что ток течет только вдоль линий постоянного потенциала — эквипотенциалей. Сопротивление Холла в этом случае для двумерного электронного газа равно

$$R_H = \frac{h}{\nu e^2}. \quad (76)$$

Если фактор заполнения будет иметь целочисленное значение, то холловское сопротивление будет определяться только фундаментальными константами. Поэтому зависимость  $R_H(B)$  имеет плато, то есть сопротивление не зависит от магнитного поля, а при изменении фактора заполнения меняется скачкообразно.

Теоретически установлено, что эффект Холла наблюдается вследствие появления связанных состояний на хвостах плотности состояний и локализации электронов на неоднородных состояниях. В первом случае возникает состояние системы с таким необычным поведением тензора сопротивления (78), которое называется *холловским изолятором*. Обращение в ноль диссипативной и холловской проводимостей показывает, что электронные состояния энергии вдали от центра уровня Ландау локализованы, а значит, электронная система при нуле

температур представляет собой диэлектрик. Квантовый эффект Холла объясняется тем, что продольное сопротивление обращается в бесконечность, а холловское сопротивление остается конечным, но экспоненциально большим.

$$\rho_{xx} = \frac{\sigma_{xx}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2}, \quad \rho_{xy} = \frac{\sigma_{yx}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2}. \quad (77)$$

В условиях квантующего магнитного поля и низких температур  $\sigma_{xx} = 0$  получаем:

$$\rho_{xx} = 0, \quad \rho_{xy} = \frac{1}{\sigma_{xy}} \quad (78)$$

Во втором случае причина такого поведения следующая. В реальных структурах электроны на уровне Ландау не обладают одинаковой энергией. Потенциал стационарного электрического поля, который служит ограничением движения электронного газа в полевом транзисторе или потенциальным барьером в гетероструктуре, оказывается неоднородным. Как правило, эта неоднородность обусловлена техническим процессом слоевого роста, наличием шероховатостей (заряженных ионов) на границе разделов двух типов гетероструктур и неоднородным распределением положительного заряда в слоях гетероструктур. Все это приводит к тому, что в одних точках двумерного слоя электростатическая энергия электрона оказывается больше, а в других — меньше. Если рассчитать потенциал (энергию) в каждой точке слоя, то получится не плоскость, как в идеальном случае, а нечто, напоминающее сильно холмистую местность с «горами» и «ямами». В условиях, когда  $\rho_{xx} = 0$ , ток может течь только вдоль линий с одинаковым потенциалом (эквипотенциалей). Реально ток течет между контактами (исток и сток). Следовательно, он может течь лишь по эквипотенциалам, соединяющим исток и сток, а таких очень немного. Основная масса эквипотенциалей замыкается внутри слоя, охватывая «горы» или «ямы», поэтому электроны, находящиеся в них, не могут переносить ток. Электроны, которые не могут покинуть свои «ямы» и «горы» — это локализованные электроны. Электроны, которые находятся на эквипотенциалах, соединяющих исток и сток и способные проводить ток, называются делокализованными.

Рассмотрим ситуацию, когда уровни Ландау до  $(i-1)$ -го включительно заполнены полностью, а следующие пусты. Добавим в слой некоторое количество электронов. Излишек электронов расположится на  $i$ -м уровне, причем электроны займут состояния в «ямах», так как там их энергия будет наименьшей. Эти электроны не могут проводить ток, поэтому для внешнего наблюдателя изменение концентрации ни к чему не приведет.

При дальнейшем увеличении числа электронов и заселенности вакантных мест в «ямах» начнут заполняться делокализованные состояния, которые могут проводить ток. Эти электроны и дают вклад в проводимость, они могут рассеиваться на примесях или на фононах. Это соответствует  $\rho_{xx} \neq 0$ , а  $R_H$  будет скачкообразно изменяться от одного плато до другого.

Затем электроны начнут заполнять локализованные состояния, охватывающие «горы»  $i$ -го уровня, но вклад в ток эти заряженные частицы давать не будут.

Плато на зависимости  $\rho_{xy}(B)$  обусловлено тем, что, несмотря на изменение числа электронов на  $i$ -ом уровне Ландау, число делокализованных электронов не изменяется, а значит, не изменяется и проводимость. Независимость  $\rho_{xy}(B)$  сохраняется и в случае, если фактор заполнения немного больше  $i$  (когда заполнены только локализованные состояния — «ямы» на  $(i+1)$ -ом уровне) или немного меньше  $i$  (когда некоторые из локализованных состояний — («гор») на  $i$ -ом уровне пусты).

Существенную роль в понимании целочисленного квантового эффекта Холла играют краевые состояния (скачущие орбиты электронов), которые образуются вблизи границы двумерного электронного газа. При нулевой температуре оказывается, что весь ток переносится краевыми состояниями, число которых совпадает с числом заполненных уровней Ландау вдали от границы. В случае резкой границы краевые состояния локализованы в направлении, перпендикулярном границе в тех точках, где электронная концентрация испытывает скачок.

Картина качественно меняется в случае плавной границы двумерного электронного газа при учете электростатического экранирования. Изменение электронной концентрации происходит в области конечной ширины в направлении, перпендикулярном границе, и нельзя определить локализацию краевых состояний.

В реальном эксперименте на движение двумерного электрона во внешнем магнитном поле оказывают влияние примеси. Если количество примесей настолько мало, что их взаимным влиянием на движение электрона можно пренебречь, то первый эффект, к которому приводит наличие примесей, — это появление состояний, отщепленных от уровня Ландау и локализованных вблизи каждой примеси. Предполагается, что появление локализованных на примесях состояний должно уменьшать холловский ток, то есть разрушать целочисленное квантование холловской проводимости. Однако холловский ток изменяться не будет.

Другой предельный случай — плавный случайный потенциал, меняющийся на масштабе, превышающем магнитную длину. Движение двумерного электрона в таком плавном потенциале оказывается почти всюду квазиклассическим — быстрое циклотронное вращение вокруг центра орбиты, который смещается в одном направлении по эквипотенциальным линиям потенциала, соответствующим энергии электрона. Тот факт, что движение электрона описывается уравнением Шредингера, приводит к возможности туннелирования электрона с одной эквипотенциальной линии на другую той же энергии в области, где обе линии подходят друг к другу на расстояние порядка магнитной длины. Наличие конечной продольной проводимости при нуле температуры возможно, если при данной энергии электрон может пройти от одной границы двумерного слоя до другой. Данный процесс возможен строго при одном значении энергии. Исследования движения двумерного электрона в магнитном поле и в плавном случайном потенциале показали, что электрон приобретает случайную фазу.

## 2.9. Экспериментальная установка для реализации квантового эффекта Холла

Гетероструктуры, подвергнутые исследованиям, были выращены по технологии эпитаксии из молекулярных пучков. На подложке из полуизолирующего GaAs (100нм) выращивался композитный буфер, состоящий из слоя GaAs (200 нм), слоя AlAs (100 нм при 570° C) и метаморфного буферного слоя AlSb или GaSb (2,4 мкм). Для всех образцов поверх буферного слоя выращивалась 10-периодная «сглаживающая» сверхрешетка GaSb (2,5нм)/AlSb (2,5нм) при 480–490 °C с суммарной слоевой толщиной 500 Å (рис. 19).

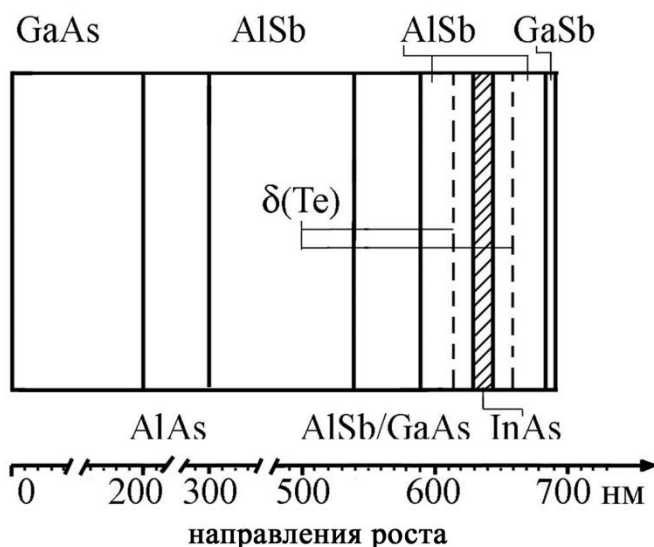


Рис. 19. Последовательность слоев в композитной наноструктуре

Квантовая яма сформирована в виде слоя InAs толщиной 150 Å, заключенного между барьерными слоями AlSb по 400 Å каждый. Структура заканчивалась закрывающим слоем GaSb (60 Å). Электроны в квантовой яме (КЯ) InAs поставлялись из двух слоев теллура, расположенных в AlSb на расстоянии 150 Å от гетерограницы InAs/AlSb. Образцы гетероструктур InAs/AlSb имели геометрию ван дер Пау размером 15×4 мм<sup>2</sup> с точечными контактами. Низкотемпературные измерения в магнитном поле были выполнены с использованием сверхпроводящего соленоида (B<10 Т) по стандартной методике; измерены  $\rho_{xx}$  и  $\rho_{xy}$  компоненты тензора  $\hat{\rho}$  магнитосопротивления в диапазоне температур 4,2–30 К.

Физические условия и геометрия образца позволяют наблюдать такие сложные и малоизученные эффекты в квантующих магнитных полях, как квантование проводимости и квантовый эффект Холла. Изучение квантового эффекта позволяет определять постоянную тонкой структуры с достаточной точностью.

Стандартная четырехконтактная схема измерений представлена на рисунке 20, причем  $\rho_{xx} = R_L = \frac{V_L W}{(I_L)}$  и  $\rho_{xy} = R_H = \frac{V_H}{(I)}$ . Обычно измерения эффекта Холла и квантового эффекта Холла проводятся с использованием шести контактов (рис. 20). Контакты 1 и 2 являются токовыми (например, 1 — исток, 2 — сток), между контактами 3 и 4 измеряется падение напряжения вдоль  $x$  (и определяется  $\rho_{xx}$ ), между 3 и 5 или 4 и 6 — падение напряжения вдоль  $y$  (и определяется  $R_H$ ).

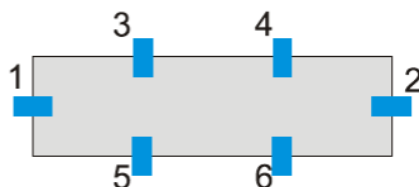


Рис. 20. Схема для наблюдения эффекта Холла

Образец располагается в центре сверхпроводящего магнита в криомагнитной вставке, размещаемой в транспортном сосуде Дьюара СТГ-40. Ось структуры параллельна направлению магнитного поля  $B$ . На поверхности образца нанесены полосковые омические контакты, позволяющие измерять сопротивление образца. Все измерения проводятся при температуре  $T = 4,2$  К.

## Практические задания по главе 2

### Практическая работа по теме

#### *«Исследование параметров вырожденного двумерного электронного газа на основе изучения осциллирующих зависимостей магнитосопротивления»*

**Цель:** изучение метода исследования осцилляций Шубникова — де Гааза, позволяющего оценить основные параметры ( $\omega_{oc}$ ,  $n_s$ ,  $T_D$ ,  $E_F$  и  $\gamma$ ) вырожденного электронного газа в низкоразмерных структурах.

**Оборудование:** компьютер с установленными программами Sigma Plot и Mathcad; экспериментальная зависимость магнитосопротивления от магнитного поля  $\rho(B)$ .

**Задание:** оценить основные параметры ( $\omega_{oc}$ ,  $n_s$ ,  $T_D$ ,  $E_F$  и  $\gamma$ ) вырожденного электронного газа в низкоразмерных структурах. Этапы:

1. Оцифровать экспериментальную кривую осцилляций Шубникова — де Гааза  $\rho_{xx}(B)$  с помощью прикладных программ (Mathcad, Gr2Digit); определить значение магнитного поля, соответствующего максимумам и минимумам осцилляций.

2. Построить график функции  $\rho_{xx}(B)$  от обратного магнитного поля  $\rho_{xx}\left(\frac{1}{B}\right)$ . В результате получится гармоническая затухающая функция (рис. 12).

3. Построить огибающие функции, проходящие через максимумы и минимумы осцилляций (рис. 12).

4. Построить среднюю линию по точкам, являющимся серединами отрезков между огибающими в зависимости от магнитного поля  $B$  (иными словами, необходимо выделить монотонный компонент).

5. Определить амплитуду максимумов и минимумов осцилляций ( $Y$ ) как расстояние от огибающей функции до средней линии.

6. Определить период осцилляций  $\Delta_{осц}$  как расстояние между соседними максимумами или минимумами в обратном магнитном поле по формуле (61).

7. Определить концентрацию  $n_s$ , используя соотношение (65).

8. Определить частоту осцилляций по формуле (64).

9. Определить значение энергии Ферми, используя выражение  $E_F = \frac{\hbar e}{2\pi m^*} \omega_{осц}$ , где  $m^*$  — эффективная масса электрона.

10. Идентифицировать номера уровней Ландау, используя соотношение (68); получить массивы  $N_{max}$ ,  $N_{min}$ .

11. Построить зависимость  $\frac{1}{B(N)}$  (верную диаграмму).

12. Определить фазу осцилляций по формуле  $\gamma = \left(2 \cdot i + \frac{1}{2}\right) \cdot \pi$ , где  $i$  — точка пересечения прямой  $\frac{1}{B(N)}$  с осью  $OX$ .

13. Создать массивы  $X_{max}$ ,  $X_{min}$  (значения магнитного поля), соответствующие максимумам и минимумам осцилляций Шубникова — де Гааза в единицах  $1/B$  ( $1/Tл$ );  $Y_{max}$ ,  $Y_{min}$  (амплитуда), соответствующие максимумам и минимумам.

14. Построить зависимость  $\delta\left(\frac{1}{B}\right)$  (график Дингла).

1) пересчитать координаты по оси  $OY$  (амплитуду осцилляций), используя соотношение  $YD = \ln \delta = \ln\left(\delta_N \frac{\text{sh}(x)}{x}\right)$ ;

2) получить массивы “ $Yd_{max}$ ”, “ $Yd_{min}$ ”;

3) построить зависимость  $YD_n\left(\frac{1}{X_n}\right)$ ;

4) аппроксимировать полученную зависимость с помощью прямой (уравнение прямой имеет вид  $r(x) = b_1 \cdot x + b_0$ ); вычислить коэффициенты при помощи встроенных функций Mathcad (71);

5) построить аппроксимированную кривую  $r(x)$  на одном графике с функцией  $YD_n\left(\frac{1}{X_n}\right)$ .

15. Определить температуру Дингла как тангенс угла наклона аппроксимированной кривой, используя соотношение (72).

### Вопросы для самоконтроля



1. Объясните поведение частицы в магнитном поле.
2. Объясните природу возникновения квантования энергетического спектра частицы.
3. Охарактеризуйте классификацию магнитных полей.
4. Объясните природу возникновения осцилляций Шубникова — де Гааза.
5. Объясните физический смысл температуры Дингла.
6. Опишите условия наблюдения квантования Ландау.
7. Объясните физический смысл фазы осцилляций.
8. Опишите поведение частицы в скрещенных электрических и магнитных полях.
9. Объясните методику построения графиков Дингла и веерных диаграмм.

### **Практическая работа по теме**

#### **«Исследование эффекта Холла в наноструктурах»**

*Цель:* поиск и исследование целочисленного эффекта Холла на основе изучения зависимости поперечного магнитосопротивления и сопротивления Холла от магнитного поля.

*Оборудование:* компьютер с установленными программами Sigma Plot и Mathcad; экспериментальная зависимость магнитосопротивления от магнитного поля  $\rho(B)$ .

*Задание:* оценить основные параметры электронного газа в низкоразмерных структурах. Этапы:

1. Ознакомиться с экспериментальной установкой для проведения исследований по эффекту Холла.
2. Ознакомиться со свойствами изучаемых гетероструктур и методами их получения.
3. Оцифровать экспериментальную кривую осцилляций Шубникова — де Гааза  $\rho_{xx}(B)$ ,  $\rho_{xy}(B)$  с помощью прикладных программ (Mathcad, Gr2Digit).
4. По положению холловских плато определить значения чисел заполнения.

## Глава 3

# МАГНИТНЫЕ СВОЙСТВА МЕТАЛЛОВ, ПОЛУПРОВОДНИКОВ И ДИЭЛЕКТРИКОВ

### 3.1. Теория парамагнетизма атомов и ионов

Необходимым признаком парамагнитного состояния вещества является наличие у его атомов собственных магнитных моментов. Поэтому парамагнетизмом обладают, например, все атомы, ионы и молекулы, у которых в электронной оболочке нечетное число электронов, поскольку при этом полный спин электронной системы всегда отличен от нуля: это касается атомов щелочных металлов, молекулы оксида азота, свободных радикалов органических соединений. Парамагнитными свойствами обладают также все атомы и ионы с незаполненной внутренней d- или f-оболочкой (переходные элементы), когда они свободны (в газах), а также, как правило, в растворах и кристаллах. Парамагнитными могут быть и молекулы с четным числом электронов (молекулярный кислород, органические бирадикалы). Большое число твердых и жидких металлов также парамагнитно.

В общем случае в отсутствие внешнего поля дезориентирующее действие теплового движения обычно не допускает образования в макротелах самопроизвольной упорядоченной ориентации собственных атомных магнитных моментов. Лишь при особых условиях обменное взаимодействие между носителями атомных магнитных моментов и при  $H=0$  может создать самопроизвольную ориентацию — ферро- и антиферромагнитное состояние.

В парамагнетиках намагниченность возникает и начинает расти лишь с включением и увеличением напряженности внешнего магнитного поля. Если поле не очень велико, так что энергия элементарных магнетиков в поле, равная по порядку величины  $\mu_B H$ , мала по сравнению с их средней тепловой энергией  $kT$ , то есть  $\mu_B H \ll kT$ , то намагниченность возрастает прямо пропорционально величине поля:

$$I \approx \chi_{\text{мп}} H, \quad (79)$$

где парамагнитная восприимчивость  $\chi_{\text{мп}}$  не зависит от поля, но сильно зависит от температуры. Опыт в ряде случаев подтверждает данный общий вывод. Однако наряду с этим существует много случаев, когда парамагнитная восприимчивость практически не зависит от температуры (например, у щелочных металлов).

### 3.2. Теория Ланжевена

Рассмотрим безграничную однородную среду, заполненную магнитными диполями с магнитными моментами  $P_m$  (элементарными контурами с током по гипотезе Ампера). Допустим, что модуль величины  $P_m$  не может измениться ( $P_m = \text{const}$ ), а объемная концентрация магнитных диполей равна  $n$ . В физически бесконечно малом объеме пространства  $dV$  содержится  $dN_\Sigma = ndV$  магнитных диполей. Полагаем, что объемная концентрация магнитных диполей достаточно мала, чтобы можно было пренебречь влиянием диполей друг на друга. Полагаем также, что под действием температуры в отсутствие внешнего силового поля распределение магнитных диполей  $P_i$  ( $i$  — номер диполя, входящего в объем  $dV$ ) является хаотичным. Интуитивный физический смысл этого утверждения очевиден. Облечем его в строгую математическую форму. Пусть элемент объема  $dV$ , а значит, совокупность магнитных диполей  $dN_\Sigma$ , находится в начале сферической системы координат  $\{r, \theta, \varphi\}$ . Элемент площади поверхности сферы, описываемой уравне-

нием  $r = \text{const}$ , имеет вид  $dS = r^2 \sin\theta d\theta d\varphi$ . Телесный угол, в пределах которого описанный элемент площади виден из начала координат, имеет вид

$$d\Omega = \frac{dS}{r^2} \sin\theta d\theta d\varphi. \quad (80)$$

Будем считать, что распределение дипольных магнитных моментов в элементе объема хаотично, если выполнено условие:

$$\frac{dN_1}{dN_2} = \frac{d\Omega_1}{d\Omega_2}, \quad (81)$$

где  $dN_1$  — число магнитных диполей с магнитным моментом (с ориентацией внутри элемента телесного угла  $d\Omega_1$ );  $dN_2$  — число магнитных диполей с магнитным моментом (с ориентацией внутри элемента телесного угла  $d\Omega_2$ ).

Смысл определения (81) сводится к положению: чем больше телесный угол, тем большее число магнитных диполей имеет направление в пределах этого угла.

Замкнутая (полная) сфера видна под углом  $4\pi$  стерадиан, а полное число рассматриваемых частиц при этом —  $dN_\Sigma$ . С учетом сказанного, из соотношения (81) можно получить:

$$dN_{\theta,\varphi} = dN_\Sigma \frac{\sin\Theta d\Theta d\varphi}{4\pi}, \quad (82)$$

где  $dN_{\theta,\varphi}$  — число дипольных магнитных моментов, направление которых лежит в пределах от  $\theta$  до  $\theta + d\theta$  и от  $\varphi$  до  $\varphi + d\varphi$ .

Обратимся к физическим ситуациям с осевой симметрией. В этих условиях соотношение (82) можно проинтегрировать по переменной  $\varphi$  в пределах от 0 до  $2\pi$ :

$$dN_\theta = dN_\Sigma * \left(\frac{1}{2}\right) \sin\theta d\theta, \quad (83)$$

где  $\theta$  — угол между осью  $Z$  и радиусом — вектором точки поверхности сферы.

Если  $p_m$  — модуль магнитного момента отдельной частицы,  $\theta$  — значение описанного выше угла, то проекция вектора  $P_m$  на направление  $Z$  имеет вид  $P_{mz} = P_m * \cos\theta$ . По правилу вычисления средней величины получим:

$$\langle p_{mz} \rangle = \frac{\int p_m \cos\Theta dN_\Theta}{\int dN_\Theta} = p_m \frac{\int_0^\pi \cos\Theta \sin\Theta d\Theta}{2} = 0. \quad (84)$$

Поскольку направление оси  $Z$  можно выбрать произвольно, то для любого направления величина  $\langle P_{mz} \rangle = 0$ . Поскольку

$$P_z = n(p_{mz}), \quad (85)$$

то из соотношения (84) следует, что хаотическое распределение векторов магнитных моментов в элементе объема  $dV$  не приводит к намагничиванию среды.

Допустим, что ось  $Z$  выбрана по направлению внешнего магнитного поля  $B$ . Теперь каждый магнитный диполь испытывает со стороны внешнего магнитного поля  $B$  воздействие, результатом которого является уменьшение угла между направлением магнитного

момента диполя  $P_m$  и направлением магнитной индукции  $B$ . Энергетической мерой этого воздействия является величина  $U = -P_m \times B$ . Тепловое движение системы магнитных диполей направлено на усиление хаотичности распределения магнитных диполей по направлению. Энергетической мерой теплового воздействия является величина  $kT$ , где  $k$  — коэффициент Больцмана,  $T$  — абсолютная температура среды.

В рассматриваемой ситуации вместо условия (81) в соответствии с принципом Больцмана должно иметь место соотношение

$$\frac{dN_1}{dN_2} = \frac{e^{\frac{U_1}{kT}} d\Omega_1}{e^{\frac{U_2}{kT}} d\Omega_2}, \quad (86)$$

где  $U_1, U_2$  — значения потенциальной функции системы в первом и во втором состоянии соответственно.

Из соотношения (86) следует:

$$dN_\Theta = dN_\Sigma \frac{e^{-\frac{U}{kT}} \sin\Theta d\Theta}{\int_0^{\pi} e^{-\frac{U}{kT}} \sin\Theta d\Theta}. \quad (87)$$

Соотношение (88) получено с использованием очевидной нормировки:

$$\int dN_\Theta = dN_\Sigma.$$

Вычисление величины  $P_{mz}$  с учетом соотношения (87) приводит к выражению

$$\langle p_{mz} \rangle = \frac{\int_0^{\pi} p_m \cos\Theta * e^{\frac{p_m B \cos\alpha}{kT}} \sin\Theta d\Theta}{\int_0^{\pi} e^{\frac{p_m B \cos\alpha}{kT}} \sin\Theta d\Theta}, \quad (88)$$

$$f(\alpha) = \text{cth}\alpha - \frac{1}{\alpha}, \quad \alpha = \frac{p_m B}{kT}, \quad (89)$$

где  $f(\alpha)$  — функция Ланжевена.

Легко проверить, что при малых значениях параметра  $\alpha$  (малые значения индукции внешнего поля, или большие значения температуры среды) функция Ланжевена равна

$$f(\alpha) \approx \frac{\alpha}{3}, \quad \alpha \ll 1,$$

При больших параметрах  $\alpha$  имеем:

$$f(\alpha) \approx 1 - \frac{1}{\alpha} + 2e^{-2\alpha}, \quad \alpha \gg 1.$$

Проекция  $\langle P_{mz} \rangle$  по выражению (88) является единственной отличной от нуля проекции  $\langle P_z \rangle$ , направление которой совпадает с направлением индукции магнитного поля  $B$ . Суммарный магнитный момент элемента объема  $dV$  определен выражением  $dp_{m\Sigma} = \langle p_m \rangle * n * dV$ .

В этом случае вектор намагниченности принимает вид

$$\vec{M} = n \langle \vec{p}_m \rangle = np_m f(\alpha) \frac{\vec{B}}{|\vec{B}|}. \quad (90)$$

Традиционно вектор  $M$  намагниченности считается функцией вектора напряженности магнитного поля  $H$ :

$$\vec{M} = np_m f(\alpha) \frac{\vec{H}}{|\vec{H}|} = \chi \vec{H}, \quad (91)$$

где  $\chi$  — магнитная восприимчивость среды. Величину  $\chi$  можно получить по формуле:

$$\chi = \mu_0 \frac{np_m^2 f(\alpha)}{kT} = \chi \vec{H}. \quad (92)$$

Заметим, что зависимость  $\chi = \chi(H)$  в общем случае не линейна. Для малых значений параметра  $\alpha$  имеем:

$$\chi = \mu_0 \frac{np_m^2}{3kT}, \quad (93)$$

что можно записать в форме закона Кюри:

$$\chi = \frac{C}{T}, \quad C = \mu_0 \frac{np_m^2}{3kT}, \quad (94)$$

где  $C$  — постоянная Кюри.

С учетом взаимодействия диполей между собой можно наблюдать, что собственное магнитное поле как результат взаимного влияния диполей друг на друга пропорционально величине намагничивания среды:

$$\vec{H}_s = \gamma \vec{M}, \quad (95)$$

где  $\gamma$  — некоторая безразмерная величина. Таким образом, при переходе от внешнего поля  $H$  к эффективному полю  $H + \gamma M$  получим формулу Ланжевена — Вейса:

$$m = f(\alpha + \beta m), \quad (96)$$

где  $m = \frac{M}{mp_m}$  — безразмерная величина,  $\alpha$  — безразмерный параметр,  $\beta = \gamma * \mu_0 * n * p_m^2 / kT$  —

безразмерный параметр, пропорциональный величине  $\gamma$ , следовательно, учитывающий влияние собственного поля магнитных диполей на эффект намагничивания среды.

Если выполнено условие  $\alpha + \beta_m \ll 1$ , можно воспользоваться асимптотическим выражением и получить

$$m = \frac{\alpha}{3 - \beta}. \quad (97)$$

Для магнитной восприимчивости среды можем записать:

$$\chi = \frac{C}{T(1 - \frac{\beta}{3})}, \quad (98)$$

где  $C$  — постоянная Кюри. Приходим к формуле закона Кюри — Вейса:

$$\chi = \frac{C}{T - \Delta}, \quad \Delta = \frac{\mu_0 n p_m^2}{3k}, \quad (99)$$

где  $\Delta$  — парамагнитная точка Кюри.

### Практическое задание по главе 3

#### Практическая работа по теме

#### «Магнитные свойства металлов, полупроводников и диэлектриков»

*Цель:* изучение магнитных свойств диа- и парамагнетиков; проверка выполнения закона Кюри — Вейса.

*Оборудование:* экспериментальная зависимость магнитной восприимчивости от температуры  $\chi(T)$ .

*Задание.*

1. Выбрать зависимость магнитной восприимчивости от температуры  $\chi(T)$  для одного из предложенных веществ.

2. Оцифровать экспериментальную кривую с помощью программы в среде Mathcad.

3. Построить теоретическую зависимость  $\chi(T)$  из закона Кюри — Вейса (19). Для нахождения вида зависимости необходимо:

1) вычислить значения постоянной Кюри ( $C$ );

2) найти значение температурной добавки Кюри — Вейса  $\Delta$ , решив систему:

$$\begin{cases} \chi_1 = \frac{C_1}{T_1 + \Delta} \\ \chi_2 = \frac{C_2}{T_2 + \Delta} \end{cases}$$

Значения  $\chi_1$  и  $\chi_2$  берутся из зависимости  $\chi(T)$ , причем должны быть близки друг к другу для того, чтобы считать  $C$  постоянной. Решая систему с двумя неизвестными  $C$  и  $\Delta$ , находим значение  $\Delta$ . Затем, подставляя все известные величины в одно из уравнений системы, находим значение точки Кюри  $C_1$ .

4. Методом, описанным выше, решить эту систему для других пар значений  $\chi_1$  и  $\chi_2$ ; вычислить соответствующие значения  $C_2$  и  $\Delta$ .

5. Вычислить значение  $\Delta$  методом усреднения полученных результатов.
6. Построить семейство кривых  $\chi(T)$ :

$$\chi_1(t) = \frac{C_1}{t + \Delta},$$

$$\chi_2(t) = \frac{C_2}{t + \Delta},$$

$$\chi_3(t) = \frac{C_3}{t + \Delta}.$$

7. На одном графике построить семейство кривых и оцифрованную экспериментальную зависимость.
8. Выделить температурный интервал, в котором ход зависимости подчиняется закону Кюри — Вейса.

### Вопросы для самоконтроля

1. Объясните сущность явления диамагнетизма и парамагнетизма.
2. С какими обстоятельствами связано происхождение магнитного момента свободного атома?
3. Дайте определение понятия «намагниченность».
4. С какими параметрами связана диамагнитная восприимчивость в теории Ланжевена?
5. Какими магнитными свойствами обладает свободный ион или атом (квантовая теория парамагнетизма).
6. Объясните воздействие температуры на парамагнитные свойства вещества (законы Кюри и Кюри — Вейса).
7. Объясните независимость парамагнитной восприимчивости электронов проводимости от температуры, при условии что  $kT \ll E_F$  (паулиевский парамагнетизм).

## Заключение

Настоящее учебно-методическое пособие по физике твердого тела и полупроводников является усовершенствованным по сравнению с предшествующими учебными программами по дисциплине «Физика твердого тела» и включает элементы теории квантовой механики, физики конденсированных сред, физических основ нанотехнологий и математических методов компьютерных технологий в научных исследованиях.

В пособии изложены основы современных физических моделей, применимых для описания полупроводниковых квантовых ям, даются некоторые сведения о строении и свойствах слоистых гетероструктур на основе твердого раствора InAs/AlSb. Описаны основные физические эффекты и явления, характерные для систем с пониженной размерностью. Особое внимание уделено квантовым эффектам и проводимости, вызванным квантово-механической интерференцией электронных волн.

В учебно-методическом пособии рассматриваются некоторые исследовательские задачи из физики твердого тела, физики полупроводников, физики квантово-размерных структур. Студентам дается краткое теоретическое описание физической проблемы и ее математической модели, формулируется задача для моделирования, включающая реализацию математической модели в математическом пакете, а также предлагается с помощью данной реализации наглядно представить, визуализировать результаты расчета в виде схем и графиков. При изложении задач акцент смещается от выведения аналитических выражений к программной реализации. Это способствует формированию у студентов навыков применения положений фундаментальной физики к грамотному научному анализу ситуаций, с которыми исследователю приходится сталкиваться при создании новой техники и новых технологий.

В дальнейшем знания и аналитические методы исследования, изложенные в пособии, могут быть использованы при подготовке выпускной квалификационной работы бакалавров, диссертационной работы магистров по теоретическим и аналитическим исследованиям свойств наноструктур.



## Список использованных источников

1. Аскеров Б. М. Электронные явления переноса в полупроводниках. — М. : Наука, 1985. — 320 с.
2. Бурмистров И. С. Введение в теорию целочисленного квантового эффекта Холла. — Черноголовка : Ред.-изд. отдел ИПХФ РАН, 2015. — 96 с.
3. Гроссе П. Свободные электроны в твердых телах. — М. : Мир, 1982. — 270 с.
4. Иконников А. В., Гавриленко В. И. Квантовый эффект Холла. — Н. Новгород : НГУ им. Н. И. Лобачевского, 2010. — 14 с.
5. Киттель И. Введение в физику твердого тела. — М. : Наука, 1978. — 791 с.
6. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. — М. : Наука, 1974. — 767 с.
7. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Электродинамика сплошных сред. — М. : Наука, 1982. — 248 с.
8. Левич В. Г., Вдовин Ю. А., Мямлин В. А. Квантовая механика. Квантовая статистика и физическая кинетика. — М. : Наука, 1971. — 936 с.
9. Петровский И. И. Электронная теория полупроводников. — Минск : БГУ, 1985. — 269 с.

Учебное издание

Афанасова Марина Михайловна

## ФИЗИКА ТВЕРДОГО ТЕЛА

Учебно-методическое пособие

Редактор *Н. И. Тангаева*  
Технический редактор *Н. В. Кулешова*

1,64 МБ. Подписано к использованию 27.10.2022. Тираж 20 CD-ROM.

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования  
«Рязанский государственный университет имени С. А. Есенина»  
390000, г. Рязань, ул. Свободы, 46; info@365.rsu.edu.ru  
Тел.: +7 (4912) 28-03-89 (канцелярия)

Редакционно-издательский центр РГУ имени С. А. Есенина  
390023, г. Рязань, ул. Ленина, 20а



Минимальные системные требования:  
тип компьютера: IBM/PC, процессор x86, частота: 1,3 ГГц,  
256 MB RAM, свободное место на HDD 25 MB, Windows XP и выше,  
Acrobat Reader 3.0 или старше, дисковод для оптических дисков, мышь