

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НЕОДНОРОДНЫХ ПО ТОЛЩИНЕ КВАНТОВАННЫХ ПЛЕНОК В МАГНИТНОМ ПОЛЕ

А. А. КИРАКОСЯН, Э. М. КАЗАРЯН, К. Т. ГАБРИЕЛЯН

В работе вычислены функция плотности состояний носителей заряда и поправка к химическому потенциалу вырожденной квантованной полупроводниковой пленки в магнитном поле с учетом случайной неоднородности толщины. Показано, что учет неоднородности приводит к образованию «хвоста» плотности состояний в двумерной запрещенной зоне, а поправка к химическому потенциалу за счет магнитного поля есть периодическая функция величины $1/H$. Рассмотрены также осцилляционные эффекты в магнитном поле и показано, что учет неоднородности толщины существенным образом влияет на осциллирующую часть термодинамического потенциала пленки.

Термодинамические свойства квантованных пленок с идеально гладкими поверхностями, помещенных в магнитное поле, перпендикулярное к поверхности пленки, были исследованы в работе [1]. Детальный анализ особенностей, связанных с эффектом размерного квантования, проведен в [2], где для экспериментального наблюдения эффектов осцилляций, помимо необходимых условий проявления размерного квантования и условия идеального отражения носителей заряда от поверхности пленки, приводятся также ограничения на величину вектора напряженности магнитного поля и на угол его отклонения от нормали к поверхности пленки.

Однако все реальные тонкие пленки обладают неоднородностью по толщине, несущей случайный характер [3]. Влияние последней на термодинамические параметры пленок исследовано в [4], где, в частности, получено выражение для плотности состояний, которая из-за неоднородности по толщине имеет так называемый «хвост» в двумерной запрещенной зоне.

В данной работе вычислены плотность состояний и химический потенциал в магнитном поле, а также осциллирующая часть термодинамического потенциала полупроводниковой пленки и показано, что учет неоднородности по толщине существенным образом влияет на результаты расчетов [2].

§ 1. Плотность состояний

Воспользуемся формулой, выражающей плотность состояний через след мнимой части одночастичной антикоммутирующей опережающей функции Грина [5],

$$\rho(E) = \frac{2}{V} \text{Sp} \text{Im} G_r^+(\lambda, \lambda'; E), \quad (1)$$

где V —объем системы, λ —набор квантовых чисел, определяющих состояние носителя заряда. Как обычно, пленка представляется в виде потен-

циальной ямы с бесконечно высокими стенками по направлению размерного квантования. Для функции Грина электронов пленки в постоянном внешнем поле можно записать [5]

$$G_r^{\pm}(\lambda, \lambda'; E) = -\frac{1}{2\pi} \delta(\lambda - \lambda') \frac{1}{E - E(\lambda) + i\varepsilon}, \quad \varepsilon = +0. \quad (2)$$

Состояние электрона в магнитном поле определяется набором $\lambda = s, n, \sigma$, где $s = 1, 2, \dots$ — пленочное, $n = 0, 1, \dots$ — магнитное, σ — спиновое квантовые числа, а спектр энергии дается формулой

$$E(\lambda) \equiv E_{ns} = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L} \right)^2 s^2 + \hbar \omega_H \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad (3)$$

где L — толщина пленки, m — эффективная масса, $\omega_H = eH/mc$ — циклотронная частота. Заметим, что в (3) мы не учли энергию спина частицы во внешнем поле, поэтому уровни энергии двукратно вырождены по спину. Учитывая, что все магнитные уровни имеют кратность вырождения, равную

$$g_n = \frac{eHS}{2\pi\hbar c}, \quad (4)$$

где S — площадь пленки, с помощью (1), (2) и (4) для $\rho(E)$ получим

$$\rho(E) = -\frac{eH}{\pi^2 \hbar c L} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{s=1}^{\infty} \text{Im} \frac{1}{E - E_{ns} + i\varepsilon}. \quad (5)$$

Учет неоднородности толщины производится следующим образом. Представим реальную толщину пленки в виде $L = L_0 + \Delta(\vec{r})$, где L_0 — толщина идеально гладкой пленки, а $\Delta(\vec{r})$ — случайное изменение толщины, зависящее от радиус-вектора в плоскости пленки. Далее произведем усреднение по функционалу от $\Delta(\vec{r})$ типа Гаусса. При усреднении воспользуемся следующим правилом [6]:

$$\langle \exp[iA\Delta(\vec{r})] \rangle_P = \exp\left(-\frac{1}{2} A^2 \psi_0\right), \quad (6)$$

где $\langle \dots \rangle_P$ означает среднее по функционалу $P(\Delta)$, а $\psi_0 = \langle \Delta(\vec{r}) \times \Delta(\vec{r}) \rangle_P$ — бинарная корреляционная функция случайной величины $\Delta(\vec{r})$, входящей в (5) через E_{ns} .

Как известно, одним из необходимых условий проявления размерного квантования является требование $|\Delta/L_0| \ll 1$ [7], поэтому толщину пленки, входящую в выражение для пленочной энергии, можно разложить в ряд по Δ/L_0 и ограничиться членом первого порядка малости

$$\frac{1}{L^2} = \frac{1}{(L_0 + \Delta)^2} \simeq \frac{1}{L_0^2} \left(1 - \frac{2\Delta}{L_0}\right). \quad (7)$$

Для проведения усреднения по $\rho(\Delta)$ удобно выражение под знаком мнимой части в (5) представить в следующем виде:

$$\frac{1}{E - E_{ns} + i\varepsilon} = \frac{1}{i} \int_0^{\infty} e^{it(E - E_{ns} + i\varepsilon)} dt. \quad (8)$$

Тогда

$$\left\langle \frac{1}{E - E_{ns} + i\varepsilon} \right\rangle_p = \frac{1}{i} \int_0^{\infty} e^{iat - \frac{1}{4} \delta_s^2 t^2} dt, \quad (9)$$

где

$$\alpha = E - E_{ns}^0, \quad E_{ns}^0 = \varepsilon_1 s^2 + \hbar \omega_H \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad \varepsilon_1 = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\pi}{L_0} \right)^2, \quad (10)$$

ε_1 — энергия первого пленочного уровня,

$$\delta_s = 2^{3/2} \varepsilon_1 s^2 \gamma \quad (11)$$

есть величина размазки s уровня, а $\gamma = (\psi_0/L_0^2)^{1/2}$ — малый параметр задачи.

С помощью (5)–(11) для усредненной плотности состояний получаем

$$\rho(E) \equiv \sum_{ns} \rho_{ns}(E) = \frac{eH}{\pi^{3/2} \hbar c L_0} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{s=1}^{\infty} \frac{1}{\delta_s} \exp \left[- \left(\frac{E - E_{ns}^0}{\delta_s} \right)^2 \right]. \quad (12)$$

Как видно из (12), функция $\rho(E)$ имеет максимумы при значениях $E = E_{ns}^0$. Однако в отличие от случая идеально гладкой пленки, для которой $\rho_{ns}(E) \sim \delta(E - E_{ns}^0)$, учет неоднородности по толщине ведет к образованию симметричных относительно E_{ns}^0 экспоненциальных «хвостов» плотности состояний, т. е. $\rho_{ns}(E) \neq 0$ для значений $E \neq E_{ns}^0$. Эффективные размеры «хвостов» — порядка величины размазки (11), пропорциональной γ . При $\gamma \rightarrow 0$ (12) переходит в выражение для идеальной пленки в магнитном поле

$$\rho(E) = \frac{eH}{\pi \hbar c L_0} \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{s=1}^{\infty} \delta(E - E_{ns}^0).$$

С другой стороны, при $H \rightarrow 0$ из (12) с помощью стандартного перехода получаем выражение $\rho(E)$ без магнитного поля (см. [4]).

§ 2. Величина химического потенциала

Рассмотрим вырожденный полупроводник и запишем условие нормировки в виде

$$n_0 = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho(E) dE}{1 + \exp[\beta(E - \mu)]}, \quad (13)$$

где $\beta = 1/kT$, n_0 — плотность, μ — химический потенциал (уровень Ферми). В случае $T=0$ с учетом (12) из (13) получим

$$n_0 = \frac{eH}{2\pi\hbar c L_0} \sum_{s=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \left[1 + \Phi \left(\frac{\mu - E_{ns}}{\delta_s} \right) \right], \quad (14)$$

где $\Phi(x)$ — интеграл ошибок. Вычисляя сумму по магнитному квантовому числу n с помощью формулы суммирования Пуассона

$$\sum_{n=0}^{\infty} f\left(n + \frac{1}{2}\right) = \int_0^{\infty} f(x) dx + 2 \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \int_0^{\infty} f(x) \cos(2\pi kx) dx, \quad (15)$$

условие нормировки (14) можно представить в следующем виде:

$$n_0 = \frac{eH}{2\pi\hbar c L_0} \sum_{s=1}^{\infty} \left\{ \frac{\mu - \varepsilon_s}{\hbar\omega_H} \left[1 + \Phi \left(\frac{\mu - \varepsilon_s}{\delta_s} \right) \right] + \frac{\delta_s}{\sqrt{\pi\hbar\omega_H}} \exp \left[- \left(\frac{\mu - \varepsilon_s}{\delta_s} \right)^2 \right] \right\} + \\ + \frac{2}{\pi} \frac{eH}{2\pi\hbar c L_0} \sum_{s=1}^{s_0} \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^k \frac{\sin [2\pi k (\mu - \varepsilon_s) / \hbar\omega_H]}{k} \exp \left[- \pi^2 k^2 \left(\frac{\delta_s}{\hbar\omega_H} \right)^2 \right], \quad (16)$$

где $s_0 = \lceil [\mu/\varepsilon_1]^{1/2} \rceil$, а квадратные скобки означают целую часть выражения, записанного в скобках. В реальных полупроводниках обычно заполнена только первая подзона (при $n_0 L_0^3 < \frac{3\pi}{2}$), поэтому в дальнейшем примем, что $s_0 = 1$.

В случае $\delta_1 = 0$ и $H = 0$ из (16) получается выражение для уровня Ферми идеально гладкой квантованной пленки [8]

$$\mu_0 = \varepsilon_1 + \frac{\pi\hbar^2 n_0 L_0}{m}. \quad (17)$$

При отсутствии магнитного поля из (16) можно определить поправку Δ_1 к μ_0 , обусловленную поверхностной неоднородностью (см. [4]).

В общем случае ($\delta_1 \neq 0$, $H \neq 0$) химический потенциал можно представить в виде

$$\mu = \mu_0 + \Delta_1 + \Delta_2 \equiv \mu'_0 + \Delta_2,$$

где Δ_2 — поправка, обусловленная магнитным полем.

Полагая $\mu \approx \mu_0$ в аргументе синуса выражения (16) из-за наличия малого экспоненциального множителя в Δ_1 (см. [4]) и ограничиваясь первым членом суммы по k в силу быстрой сходимости, а также с учетом (17), для Δ_2 получим следующее выражение:

$$\Delta_2 = \frac{\hbar\omega_H}{\pi} \sin \left(\frac{2\pi^2 \hbar c n_0 L_0}{eH} \right) \exp \left[- \pi^2 \left(\frac{\delta_1}{\hbar\omega_H} \right)^2 \right]. \quad (18)$$

Таким образом, поправка, обусловленная магнитным полем, как и следовало ожидать, является периодической функцией величины $1/H$ с периодом, равным

$$\Delta \left(\frac{1}{H} \right) = \frac{e}{2\pi\hbar c n_0 L_0}. \quad (19)$$

§ 3. Осцилляционные эффекты в магнитном поле

Как известно, термодинамические и кинетические характеристики твердых тел в квантующем магнитном поле являются периодическими функциями напряженности магнитного поля [9] (например, осцилляции коэффициента электропроводности—эффект Шубникова—де Гааза и магнитной восприимчивости—эффект де Гааза—ван Альфена). Причина этих явлений—квантование движения электрона в магнитном поле. В случае тонких квантованных пленок размерное квантование движения электрона ведет к новым осцилляциям, не наблюдаемым в массивных образцах.

Термодинамический потенциал единицы объема пленки выражается формулой

$$\Omega = -kT \frac{m\omega_H}{\pi \hbar L} \sum_{s=1}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} \ln \left[1 + \exp \frac{\mu - E_{ns}}{kT} \right]. \quad (20)$$

Выполнив суммирование по n с помощью формулы Пауссона и выделив осциллирующую часть, выражение для Ω можно представить в виде [2]

$$\Omega = \Omega_0 + \sum_l \Omega_l^{\text{осц}}, \quad (21)$$

$$\Omega_l^{\text{осц}} = (-1)^{l+1} \frac{m\omega_H}{\pi^2 L l} \operatorname{Im} \sum_{s=1}^{\infty} e^{2\pi i l (\hbar\omega_H)^{-1} (\mu - E_s)} F_l(E_s - \mu),$$

где

$$F_l(E_s - \mu) = -i\pi kT \theta(\mu - E_s) [\operatorname{sh}(2\pi^2 l kT / \hbar\omega_H)]^{-1}. \quad (22)$$

Для проведения операции усреднения воспользуемся известным интегральным представлением единичной ступенчатой функции

$$\theta(x) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{ixz} dz}{z - i\eta}, \quad \eta > 0, \quad (23)$$

а также (7). В результате усреднения и интегрирования для l -ой гармоники осциллирующей части термодинамического потенциала получим

$$\begin{aligned} \Omega_l^{\text{осц}} = & (-1)^l \frac{m\omega_H kT}{\pi l L_0 \operatorname{sh}(2\pi^2 l kT / \hbar\omega_H)} \operatorname{Re} \left\{ \sum_{s=1}^{\infty} \exp \left(2\pi i l \frac{\mu - \varepsilon_s s^2}{\hbar\omega_H} \right) \times \right. \\ & \left. \times \exp \left[-\pi^2 l^2 \left(\frac{\partial_s}{\hbar\omega_H} \right)^2 \right] G_l(s), \right. \end{aligned} \quad (24)$$

где

$$G_l(s) = \frac{1}{2} \left\{ 1 + \Phi \left(\frac{\mu - \varepsilon_s s^2}{\partial_s} + i \frac{\pi l}{2} \frac{\partial_s}{\hbar\omega_H} \right) \right\}. \quad (25)$$

Нетрудно убедиться, что при $\partial_s \rightarrow 0$, т. е. для идеально гладкой пленки, из (24) и (25) получаются (21) и (22).

Самое существенное отличие (24) от соответствующего выражения, полученного в [2], заключается в появлении экспоненциального множителя $\exp \left[-\pi^2 l^2 \left(\frac{\delta_s}{\hbar \omega_H} \right)^2 \right]$, который показывает, что основной вклад в $\Omega_{\text{осп}}$ дает первая гармоника $l=1$, причем вклад от пленочных уровней уменьшается экспоненциально с показателем, пропорциональным s^4 .

Амплитуда первого максимума ($s=1$) при наличии неоднородности по толщине будет того же порядка, что и в случае идеально гладкой пленки, если

$$\pi^2 \left(\frac{\delta_1}{\hbar \omega_H} \right) \ll 1 \quad (26)$$

или же

$$\rho_H \ll L_0, \quad (27)$$

где $\rho_H = \left(\frac{\hbar c}{eH} \right)^{1/2}$ — радиус квантовой орбиты электрона в магнитном поле. При переходе от (26) к (27) принято, что по порядку величины $\gamma \pi^4 \sim 1$.

Амплитуда второго максимума ($s=2$) будет экспоненциально малой по сравнению с $s=1$ из-за множителя $\sim e^{-s^4}$. Причину практического отсутствия осцилляций при $s>1$, по-видимому, можно объяснить следующим образом. Как известно, осцилляции получаются всякий раз, когда пленочные уровни совпадают с каким-либо из уровней Ландау [2]. Неоднородность по толщине ведет к размытию уровней E_{ns}^0 по порядку равную $\delta_s \sim \gamma \epsilon_1 s^2$, поэтому и совпадение уровней Ландау с пленочными уровнями теряет резонансный характер, что и должно приводить к практическому отсутствию осцилляций. Заметим, что подобный эффект ослабления амплитуды осцилляций за счет конечной ширины (размазки) энергетических уровней в массивных образцах был получен в [10], где ослабление выражается множителем, пропорциональным $\exp \left(-2\pi \frac{\Delta \epsilon}{\hbar \omega_H} \right)$, а $\Delta \epsilon \sim \hbar/\tau$ — размазка энергетических уровней из-за электрон-электронных столкновений.

Ереванский государственный
университет

Поступила 24.XII.1973

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. А. Э. Гуревич, А. Я. Шик. ЖЭТФ, 54, 1873 (1968).
2. Г. А. Гоадзе, И. О. Кулик. ФТТ, 11, 2182 (1969).
3. К. Л. Чо..ра. Электрические явления в тонких пленках, Изд. Мир, М., 1972.
4. А. В. Чаплик М. В. Энтин. ЖЭТФ, 55, 990 (1968); Э. М. Каварян, А. А. Киракосян. Препринт ЕГУ, Ереван, 1973.
5. В. А. Бонч-Бруевич, С. В. Тябликов. Методы функций Грина в статистической механике, Изд. ФМЛ, М., 1961.
6. В. А. Бонч-Бруевич, Сб. Статистическая физика и квантовая теория поля, Изд. Наука, М., 1973.
7. В. Я. Демиховский, Б. А. Тавегр. Радиотехника и электроника, 11, 1147 (1966).

8. Н. С. Рытова. ФТТ, 8, 6, 725 (1966).
9. Дж. Займан. Принципы теории твердого тела. Изд. Мир, М., 1966.
10. R. B. Dingle. Proc. Roy. Soc., A211, 517 (1952).

**ՀԱՍՏՈՒԹՅԱՆ ԱՆՀԱՄԱՍԵՌ ՔՎԱՆՏԱՅԻՆ ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴՉԱՅԻՆ
ԹԱՂԱՆԹՆԵՐԻ ԹԵՐՄՈՂԻՆԱՄԻԿԱԿԱՆ ՀԱՏԿՈՒԹՅՈՒՆՆԵՐԸ
ՄԱԳՆԵՒԱԿԱՆ ԴԱՇՏՈՒՄ**

Ա. Ա. ԿԻՐԱԿՈՍՅԱՆ, Է. Մ. ԿԱԶԱՐՅԱՆ, Կ. Թ. ԳԱԲՐԵԼՅԱՆ

Հաշվված է մագնիսական դաշտում գտնվող քվանտացված ալյասեռված կիսահաղորդչային թաղանթի լիցքակիրների վիճակների խտության ֆունկցիան և քիմիական պոտենցիալի փոփոխությունը թաղանթի հաստության պատահական փոփոխությունների հաշվառմամբ (անհամասեռություն ըստ հաստության): Ցույց է տրված, որ անհամասեռության հաշվառումը բերում է երկրչափ արգելված գոտում խտությունների ֆունկցիայի «պուլի» առաջացմանը, իսկ մագնիսական դաշտի հաշվին քիմիական պոտենցիալի փոփոխությունը $1/H$ մեծության պարբերական ֆունկցիա է: Դիտարկված են նաև օսցիլյացիոն երևույթները մագնիսական դաշտում և ցույց է տրված, որ հաստության անհամասեռության հաշվառումը էապես ազդում է թաղանթի թերմոդինամիկական պոտենցիալի օսցիլյացիոն մասի վրա:

**THERMODYNAMICAL PROPERTIES OF QUANTIZED
THICKNESS-INHOMOGENIOUS FILMS IN A MAGNETIC FIELD**

A. A. KIRAKOSSYAN, E. M. KAZARYAN, K. T. GABRIELIAN

The state density function of charge carriers and the correction for the chemical potential for degenerated quantized semiconductor film in a magnetic field are calculated taking into account random changes of film thickness (thickness-inhomogeneity). It is shown that the consideration of the inhomogeneity leads to the formation of a „tail“ of the state density function in the two-dimensional forbidden band and the correction for the chemical potential due to the magnetic field is a $1/H$ periodic function. The oscillation effects in a magnetic field are also considered and it is shown that the thickness-inhomogeneity essentially influences the oscillating part of thermodynamical potential of the film.