

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР МОДЕЛЬНЫХ МНОГОСЛОЙНЫХ ПЕРИОДИЧЕСКИХ СТРУКТУР

Э. А. КАСАМАНЯН

В предположении δ -образного потенциала между слоями многослойной структуры получено точное решение задачи об энергетическом спектре. Периодическое поле решетки учитывается явно через функцию Грина электрона в указанном поле. В качестве примера рассмотрен энергетический спектр в «двойной» модели Кронига—Пенни. Здесь получены условия, определяющие высоколежащие в зоне проводимости мини-зоны. Рассмотрена также область запрещенной зоны, где может образоваться разрешенная мини-зона. Ширина последней оказывается довольно чувствительной к ее положению в запрещенной зоне. Приведены оценки эффективной массы по краям этой мини-зоны. При этом эффективная масса может быть как больше, так и меньше (на два или три порядка) массы свободного электрона. В случае произвольного периодического поля внутри отдельного слоя сверхрешетки в области, далекой от краев зон, результаты можно выразить через характерный параметр, слабо зависящий от энергии.

В в е д е н и е

В последние годы большое внимание привлекает к себе всестороннее исследование многослойных структур (см., напр., [1—7]). Возможность появления отрицательного участка дифференциальной проводимости в полупроводниковых периодических многослойных структурах делает эту область весьма перспективной с практической точки зрения. Вместе с тем эта область исследований представляет и общефизический интерес.

Основной вопрос, требующий детального изучения в первую очередь, — это исследование энергетического спектра системы. Исследование энергетического спектра модельных многослойных структур даст возможность получить основные закономерности формирования нового спектра, исследовать структуру спектра в целом. В некоторых многослойных структурах задачу можно ставить одномерно, что облегчает теоретическое рассмотрение, а полученные при этом результаты наряду с методической могут иметь и практическую ценность.

В недавно вышедшей работе [8] предложен метод последовательного и точного учета взаимодействий применительно к исследованию энергетического спектра нарушений в кристалле и в одномерном модельном случае получены некоторые точные результаты. Этот метод можно успешно применить в многослойных структурах, точно учитывая при этом периодическое поле исходного кристалла. Это позволяет не ограничиваться приближением эффективной массы и исследовать тем самым и высоколежащие мини-зоны. Кроме того, как показано в [8], в одномерной модельной «решетке» при наличии нарушения в запрещенной зоне может возникнуть дискретный уровень (мелкий или

глубокий), который удается вычислить. Если слои многослойной структуры разделены полупроницаемыми потенциальными барьерами, то вместо уровня образуется разрешенная мини-зона, находящаяся в запрещенной зоне. Такое изменение спектра может оказаться весьма важным в кинетических явлениях, однако здесь мы ограничимся лишь вопросами исследования энергетического спектра.

§ 1. Постановка задачи и выбор модели

Допустим, что мы имеем трехмерную решетку, периодическое поле которой не будем пока конкретизировать. Пусть на эту решетку в одном направлении накладывается дополнительное периодическое поле $V(x)$ с периодом d , кратным постоянной решетки a в этом направлении. Из-за отсутствия дополнительного поля в двух остальных направлениях, перпендикулярных к выбранному, компоненты двухмерного волнового вектора основной решетки есть точные квантовые числа и по этим компонентам функция Грина электрона в суммарном поле диагональна. Таким образом, наша задача сводится к одномерной в направлении дополнительного периодического поля.

Для нахождения спектра системы мы будем пользоваться уравнениями для функции Грина, а не уравнением для волновой функции. Нахождение явного вида функции Грина необходимо в ряде задач, если пользоваться методом последовательного учета взаимодействий [8].

Уравнение для функции Грина электрона в нашей системе запишем в виде [8]

$$G(x, x') + \int dx'' G_0(x, x'') V(x'') G(x'', x') = G_0(x, x'), \quad (1)$$

где $G_0(x, x')$ — функция Грина электрона в трехмерной периодической решетке. В связи со сказанным выше G_0 зависит лишь от одномерных координат x, x' , а по двум остальным направлениям берется представление двухмерного квазиволнового вектора (для простоты мы не указываем соответствующих индексов, по которым функция Грина G_0 диагональна).

Функция Грина электрона в идеальной решетке удовлетворяет известному соотношению

$$G_n(x + na, x' + na) = G_0(x, x'), \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \quad (2)$$

где a — постоянная решетки в направлении x .

Удобно в уравнении (1) перейти к Фурье-образу лишь по второму аргументу x' . Используя также периодичность дополнительного потенциала $V(x)$ с периодом $d = ma$ (m — некоторое целое число), уравнение (1) можно привести к виду (интеграл берется по периоду d)

$$G(x, k') + \int dx'' \sum_n G_0(x, x'' + dn) e^{ik'dn} V(x'') G(x'', k') = G_0(x, k'). \quad (3)$$

Уравнение типа (3) для волновой функции электрона в идеальной решетке хорошо известно (см., напр., [9]). Однако в нашем случае функция G_0 точно учитывает периодическое поле решетки. При получении (3) использовано свойство полной функции Грина

$$G(x + dn, k') = e^{ik'dn} G(x, k'), \quad (4)$$

которое эквивалентно соответствующему свойству волновой функции электрона в периодическом поле.

Исходя из уравнения (3), можно развить приближенные методы расчета энергетического спектра многослойной структуры, задавая дополнительное поле $V(x)$ в какой-нибудь модели.

Здесь мы рассмотрим одну простую модель, когда радиус действия потенциала мал по сравнению со всеми параметрами задачи, имеющими размерность длины. Тогда справедливо приближение

$$V(x) = V'\delta(x), \quad 0 < x < d. \quad (5)$$

Фактически наша модель (5) сводится к модели Кронига-Пенни для дополнительного потенциала многослойной структуры. Подчеркнем, что потенциал решетки пока не конкретизирован.

В модели (5) легко найти решение уравнения (3)

$$G(x, k') = G_0(x, k') - \frac{V' \sum_n G_0(x, dn) e^{ik'dn} G_0(0, k')}{1 + V' \sum_n G_0(0, dn) e^{ik'dn}}. \quad (6)$$

Если для дополнительного поля выбрать модель, соответствующую модели двухатомной цепочки с δ -образными потенциалами, т. е.

$$V(x) = V_1'\delta(x) + V_2'\delta(x - c), \quad (7)$$

то решение уравнения (3) имеет вид

$$G(x, k') = G_0(x, k') - \frac{1}{D} \left[V_1' \sum_n G_0(x, dn) e^{ik'dn} N_1 + V_2' \sum_n G_0(x, c + dn) e^{ik'dn} N_2 \right], \quad (8)$$

где

$$D = \begin{vmatrix} 1 + V_1' \sum_n G_0(0, dn) e^{ik'dn} & V_2' \sum_n G_0(0, c + dn) e^{ik'dn} \\ V_1' \sum_n G_0(c, dn) e^{ik'dn} & 1 + V_2' \sum_n G_0(c, c + dn) e^{ik'dn} \end{vmatrix},$$

N_1 и N_2 получаются из детерминанта D заменой соответствующего столбца на столбец

$$\begin{Bmatrix} G_0(0, k') \\ G_0(c, k') \end{Bmatrix}.$$

Знание полной функции Грина дает возможность найти энергетический спектр системы. Кроме того, задачу о нарушениях в такой системе в модельном случае короткодействующего потенциала удастся точно описать знанием именно этой функции (см. [8]). Не пред-

ставляет труда найти также функцию Грина электрона в тонкой пленке в модели бесконечно глубокой потенциальной ямы. Для этого необходимо лишь в формуле (6) перейти к пределу $V' \rightarrow \infty$, а в формуле (8) — $V'_1 = V'_2 \rightarrow \infty$.

Удобной характеристикой энергетического спектра является плотность состояний. Для нее стандартным способом находим

$$\rho(E) = \rho_0(E) - \frac{1}{\pi} I_m \sum \frac{\partial D}{\partial E} = \rho_0(E) \delta_{V', 0} + \sum \frac{\partial D}{\partial E} \delta(D), \quad (9)$$

где сумма берется по всем квантовым числам, от которых зависит энергия E .

Исследование данного вопроса далее становится более наглядным при конкретизации периодического поля решетки и задании соответствующей функции Грина.

§ 2. Энергетический спектр „двойной“ модели Кронига-Пенни

Конкретизация периодического поля решетки в какой-нибудь модели позволяет провести вычисления в явном виде и тем самым придать результатам наглядный и законченный вид. С этой целью мы выберем периодическое поле решетки в виде простой одномерной модели Кронига-Пенни. Функция Грина в этой модели известна [8] (впрочем ее нетрудно также получить из формулы (6) заменой $V' \rightarrow V$, $d \rightarrow a$)

$$G_0(0, dn) = \frac{i \sin \alpha a}{2\alpha \sin \beta a} e^{i\beta d |n|}, \quad (10)$$

где

$$\alpha = \sqrt{E} \quad (\hbar = 2m_0 = 1), \quad P = \frac{aV}{2},$$

$$\cos \beta a = \cos \alpha a + P \frac{\sin \alpha a}{\alpha a}.$$

Формула (10) относится к случаю, когда энергия E лежит в пределах разрешенных зон; в противном случае функция Грина получается с помощью аналитического продолжения: $\beta = i\gamma$, $\gamma > 0$.

Уравнение для определения энергетического спектра в модели (5) принимает вид $\left(d = ma, P' = \frac{aV'}{2} \right)$

$$\cos kam = \cos \beta am + P' \frac{\sin \alpha a}{\alpha a} \frac{\sin \beta am}{\sin \beta a} \quad (11)$$

или

$$\cos kam = \operatorname{ch} \gamma am + P' \frac{\sin \alpha a}{\alpha a} \frac{\operatorname{sh} \gamma am}{\operatorname{sh} \gamma a}. \quad (11a)$$

Полученные уравнения дают полное представление о структуре

спектра в целом. В частности, легко видеть, что каждая разрешенная зона (уравнение (11)) расщепляется на m разрешенных и соответственно запрещенных мини-зон, причем один край разрешенной мини-зоны определяется условием

$$\beta = \frac{\pi}{m\alpha} n, \quad n = 1, 2, \dots, m. \quad (12)$$

Выражение (12) представляет собой условие квантования проекции квазиволнового вектора в направлении, перпендикулярном плоскости пленки, если для последней выбрать модель бесконечно глубокой ямы.

Далее, на нижнем крае разрешенной зоны возникает запрещенная мини-зона, а вблизи верхнего края — разрешенная мини-зона. Вблизи краев зон мы просто имеем модель Кронига-Пенни с эффективной массой электрона, так что вблизи них нет необходимости задавать периодическое поле решетки в виде модели.

Для исследования энергетического спектра глубоко в разрешенной зоне заметим следующее. Выражение

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{P' \sin \alpha a}{\alpha a \sin \beta a} \quad (13)$$

в пределах достаточно малой области изменения энергии (точнее, в пределах одной мини-зоны) далеко от краев зон есть медленно меняющаяся функция по сравнению с $\sin \beta a m$, если $m \gg 1$. Поэтому выражение (13) можно рассматривать как константу, например, в точке

$$\beta_0 a = \frac{\pi}{m} n_0,$$

где n_0 — некоторое число, нумерующее соответствующую мини-зону. Тогда можно явно определить зависимость β от k

$$\cos(\beta d - \varphi_0) = \cos \varphi_0 \cos kd. \quad (14)$$

При выполнении равенства (14) мы фактически знаем закон дисперсии в соответствующей мини-зоне. Границы мини-зоны определяются условием

$$|\cos \beta d + \operatorname{tg} \varphi_0 \sin \beta d| = 1, \quad (15)$$

что позволяет определить соответствующие ширины запрещенных мини-зон, примыкающих к выбранной разрешенной мини-зоне.

Запрещенная зона является наиболее трудным для теоретического рассмотрения участком спектра, где нарушения в кристалле могут создать глубокие уровни. В выбранной нами модели не представляет труда исследовать возможную разрешенную мини-зону в запрещенной зоне.

Как известно [8], при наличии одного нарушения в одном узле в модели Кронига-Пенни возможные уровни в запрещенной зоне определяются уравнением

$$\frac{P' \sin \alpha a}{\alpha a \operatorname{sh} \gamma a} + 1 = 0. \quad (16)$$

Периодическое расположение таких нарушений с периодом d дает нам модель многослойной структуры, энергетический спектр которой в запрещенной зоне определяется уравнением (11а). Сравнивая уравнения (11а) и (16), мы видим, что разрешенная мини-зона образуется вблизи уровня нарушения. Предположим, что уравнение (16) допускает решение, соответствующее не слишком мелкому уровню, так что выполняются неравенства

$$\gamma a \ll 1, \quad \gamma a m \geq 1. \quad (17)$$

При выполнении этих неравенств область локализации электрона при наличии нарушения в решетке значительно превышает постоянную решетки a , но меньше, чем постоянная сверхрешетки d . Тогда в запрещенной зоне возникает разрешенная мини-зона с заметной шириной. Хотя полученная ниже формула справедлива в случае глубокого уровня нарушения ($\gamma a \sim 1$), возникающая мини-зона практически будет иметь нулевую ширину.

В случае (17) удобно провести разложение по энергии вблизи уровня нарушения

$$a = a_0 + \delta a, \quad |\delta a| \ll a_0,$$

где a_0 удовлетворяет уравнению (16).

Тогда для закона дисперсии получаем выражение

$$\overline{E} \simeq E_0 [1 + 4\xi_0 e^{-\gamma_0 d} (\cos kd - e^{-\gamma_0 d})]. \quad (18)$$

Здесь E_0 — положение дискретного уровня нарушения, $\gamma_0 = \gamma(a_0)$,

$$\xi_0^{-1} = \left| 1 - \frac{P^2}{P'^2} \left(1 + \frac{(a_0 a)^2}{P} \cdot \frac{2 + \sin 2 a_0 a}{1 - \cos 2 a_0 a} \right) \right| \sim 1.$$

Как видим, для закона дисперсии получается выражение, где фактически учитывается взаимодействие ближайших соседей в приближении сильной связи. Подчеркнем, однако, что последнее приближение справедливо для дополнительного периодического поля многослойной структуры и ни в коем случае не относится к потенциалу решетки. Далее, в формуле (18) последний член хотя и мал, но мы его оставляем, чтобы подчеркнуть несимметричность образовавшейся мини-зоны относительно уровня нарушения E_0 .

Интересно сравнить эффективную массу m_0^* с массой свободного электрона m_0 вблизи краев мини-зоны

$$|m_0^*| \simeq m_0 \frac{e^{\gamma_0 a m}}{2 m^2 (a_0 a)^2}, \quad a_0 a \geq \pi.$$

Если уровень нарушения глубокий ($\gamma_0 a \sim 1$), то эффективная масса может стать больше массы свободного электрона. В случае неравенств (17) m_0 может на несколько порядков (два или три) превышать m_0^* .

§ 3. Выводы

Модель многослойной структуры, рассмотренная в предыдущих параграфах, дает также возможность получить некоторые сведения общего характера, не связанные с самой моделью. К их числу относится применимость приближения сильной связи для дополнительного потенциала в случае не слишком мелкого уровня нарушения. Если для дополнительного потенциала выбрать достаточно реалистическую форму, то указанное приближение по-прежнему будет справедливо. Трудности возникают при учете реального периодического поля кристалла при определении уровня нарушения и волновой функции локального состояния.

В качестве конкретной реализации рассмотренной модели можно выбрать тонкие пленки (толщиной $\sim 100 \text{ \AA}$) одного и того же кристалла, помещая между слоями диэлектрические тонкие прослойки (порядка нескольких атомов). Тогда потенциал между слоями можно аппроксимировать δ -функцией.

В общем случае произвольного периодического поля решетки одномерная функция Грина удовлетворяет условию

$$G_0(0, dn) = G_0(0, 0) e^{i\beta d |n|}.$$

Поэтому энергетический спектр нашей модельной периодической структуры определяется уравнением

$$\cos k'd = \cos \beta d - iV' G_0(0, 0) \sin \beta d,$$

где β — квазиволновое число исходного кристалла, периодическое поле которого учитывается функцией $G_0(0, 0)$.

В частности, если периодическое поле задавать в виде одномерной двухатомной цепочки с δ -образными потенциалами, то соответствующую функцию Грина легко найти из формулы (8)

$$G_0(0, dn) = \frac{i}{V_1} \frac{\cos \beta a - \cos \beta_2 a}{\sin \beta a} e^{i\beta d |n|},$$

$$\cos \beta a = \cos \alpha a + \frac{P_1 + P_2}{aa} \sin \alpha a + 2 \frac{P_1 + P_2}{(aa)^2} \sin \alpha a \sin \alpha (a - b),$$

$$\cos \beta_2 a = \cos \alpha a + \frac{P_2}{aa} \sin \alpha a,$$

где P_1 и P_2 — параметры потенциалов двухатомной цепочки, b — минимальное расстояние между разными атомами.

Из рассмотренного частного примера мы видим, что функция $G_0(0, 0)$ в общем случае имеет довольно сложный вид. Тем не менее в пределах малой области изменения энергии, как и в § 2, неизвестная функция Грина идеальной решетки вдали от краев зон есть медленно меняющаяся функция энергии. Это позволяет записать закон дисперсии в разрешенных мини-зонах по-прежнему в виде (14) с характерным параметром φ , зависящим от исходного кристалла и номе-

ра рассматриваемой мини-зоны. Один из краев мини-зон в общем случае по-прежнему дается условием (12) независимо от конкретного вида потенциала решетки. Ширина соответствующей мини-зоны определяется параметром φ , который связан с функцией Грина $G_0(0, 0)$ соотношением

$$\operatorname{tg} \varphi = -iV'G_0(0, 0).$$

Независимо от функции $G_0(0, 0)$ вычисление одномерной плотности состояний по формуле (9) можно провести до конца; тем самым плотность состояний выражается явно через $G_0(0, 0)$. Во избежание недоразумений следует отметить, что функция $G_0(0, 0)$ не выражается непосредственно через плотность состояний идеальной решетки, но корреляции между ними все же есть. Это следует из формулы для плотности состояний

$$\rho_0(E) = \frac{1}{\pi a} \int_0^a dx I_m G_0(x, x).$$

В случае функции Грина свободной частицы между упомянутыми величинами имеется простая зависимость, поскольку $G_0(x, x) = G_0(0, 0)$.

Таким образом, рассмотренная модель многослойной периодической структуры характеризуется возможностью достаточно полного исследования энергетического спектра. Поскольку в многослойных структурах мы имеем дело с мини-зонами, то статистический разброс толщин слоев и потенциалов между ними может заметно влиять на исследованную зонную структуру. Исследование этих вопросов, видимо, заслуживает отдельного рассмотрения и выходит за рамки этой работы.

В заключение автор выражает благодарность В. Л. Бонч-Бруевичу за ценные замечания.

ЛИТЕРАТУРА

1. L. Esaki, P. Tsu. IBM J. Res. Dev., 8, 27 (1970).
2. М. И. Овсянников, Ю. А. Романов, В. И. Шабанов, Р. Г. Логинова. ФТП, 4, 2225 (1970).
3. Ж. И. Алферов, Ю. В. Жилев, Ю. В. Шмарцев. ФТП, 5, 196 (1971).
4. Р. Ф. Казаринов, Р. А. Сулис. ФТП, 5, 797 (1971); ФТП, 6, 148 (1972).
5. Р. Ф. Казаринов, Ю. В. Шмарцев. ФТП, 5, 800 (1971).
6. Ю. А. Романов. ФТП, 5, 1434 (1971).
7. А. Я. Шик. ФТП, 6, 1268 (1972).
8. З. А. Касаманян. ЖЭТФ, 61, 1215 (1971).
9. Дж. Займан. Принципы теории твердого тела, Изд. Мир, М., 1966.

ՄՈՒԵԼԱՑԻՆ ԲԱԶՄԱՇԵՐՏ ՊԱՐԲԵՐԱԿԱՆ ԿԱՌՈՒՑՎԱԾՔՆԵՐԻ
ԷՆԵՐԳԵՏԻԿ ՍՊԵԿՏՐԸ

Ձ. Հ. ԿԱՍԱՄԱՆՅԱՆ

Ենթադրելով, որ բաղձաշերտ պարբերական կառուցվածքի շերտերի միջև պոտենցիալները δ - նման են, ստացված է էներգետիկ սպեկտրի խնդրի ճշգրիտ լուծումը: Հաշվի է առնված նաև բյուրեղի պարբերական պոտենցիալը այդ դաշտում էլեկտրոնի Գրինի ֆունկցիայի միջոցով: Որպես օրինակ քննարկված է Կրոնիգ-Պենիի «կրկնակի» մոդելի էներգետիկ սպեկտրը: Ստացված են հաղորդական գոտում միևնույնի դիրքերի որոշման պայմանները: Ուսումնասիրված է նաև արգելված գոտու տիրույթը, որտեղ կարող է առաջանալ թուլատրելի միևնույնի փերչենիս լայնությունը բավական զգալուն է արգելված գոտում նրա զրաված դիրքից: Բերված են էֆեկտիվ զանգվածի գնահատումները այդ միևնույնի գոտու եզրերում: Պարզվում է, որ էֆեկտիվ զանգվածը կարող է լինել ինչպես մեծ, այնպես էլ փոքր (երկու կամ երեք կարգով) ազատ էլեկտրոնի զանգվածից:

THE ENERGY SPECTRUM OF MODEL MULTILAYER
PERIODIC STRUCTURES

Z. H. KASAMANYAN

Assuming a δ -type potential between the layers of the multilayer structure the exact solution of the energy spectrum problem is obtained. A periodic potential of the lattice is taken into account through the Green function of the electron in that field. The conditions determining high mini-zones in the conduction band are obtained. A region of the formation of allowed mini-zone in the forbidden band is also considered, the width of the mini-zone being sensitive to its position in the forbidden band. The evaluation of the effective mass of electron at edges of that mini-zone gives it may be both larger or smaller (by two or three orders) than the mass of the free electron. In the case of an arbitrary periodic field in layers of the superlattice in the region far from the edges of the band the results may be expressed by a characteristic parameter slowly changing with energy.