

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ УРОВНИ НАРУШЕНИЙ В МОДЕЛЬНОЙ МНОГОСЛОЙНОЙ ПЕРИОДИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЕ

З. А. КАСАМАНЯН

Исследуется влияние одномерного модельного периодического поля сверхрешетки на дискретный энергетический уровень дефектов в кристалле. Показано, что вместо одного уровня образуется набор уровней. Исследованы также одномерные дискретные уровни, возникающие в запрещенных минизонах разрешенной зоны из-за отклонения от периодичности потенциала сверхрешетки.

В предыдущей работе [1] было показано, что энергетический спектр модельной многослойной периодической структуры удается точно вычислить, коль скоро известна функция Грина исходного кристалла. В методическом отношении важной является возможность точного описания структуры спектра в целом. Используемый в [1] подход дает также возможность несколько расширить круг задач, представляющих интерес в случае отклонения многослойной структуры от идеальности. В частности, легко учесть малый статистический разброс толщин слоев и потенциалов между ними, что приводит к затуханию состояний с фиксированным значением квазиимпульса.

Другим примером является исследование энергетических уровней дефектов. Если исходный кристалл содержит дефекты, создающие энергетические уровни в запрещенной зоне, то в многослойной структуре положения этих уровней, вообще говоря, могут меняться. Если примеси одного сорта в кристалле находятся достаточно далеко друг от друга, то из-за слабого перекрытия волновых функций локальных состояний мы наблюдаем практически дискретный уровень. При создании многослойной структуры эти примесные атомы могут находиться в слоях в неодинаковых условиях. В частности, будут слои, где примесных атомов вовсе нет, а в других они могут находиться на разных расстояниях от переходного слоя. Вследствие этого вместо одного уровня исходного кристалла в многослойной структуре будем иметь целый набор уровней*. Исследование их в трехмерном случае встречает большие трудности, но в модельном одномерном случае, оказывается, можно получить точное решение. Тем самым можно получить качественное представление об энергетических уровнях дефектов в многослойной структуре.

Кроме отмеченного выше есть случай, представляющий реальный интерес в многослойных структурах. Если дополнительный потенциал сверхрешетки отклоняется от периодического, то в запрещенных минизонах могут возникнуть одномерные дискретные уровни. Исследование таких уровней несколько облегчается из-за возможной одномерной постановки зада-

* Несколько аналогична ситуация в обычном кристалле, если допустить, что примеси могут находиться в узлах решетки и междоузлиях. Здесь, вообще говоря, возникает несколько уровней.

чи. Однако эти уровни могут быть глубокими и потому их исследование должно быть проведено в рамках теории глубоких уровней. Поскольку энергетический спектр идеальной структуры удастся точно описать в рамках модели [1], то исследование энергетических уровней дефектов имеет смысл провести в рамках той же модели.

Допустим, мы имеем один дефект в идеальной сверхрешетке. Пусть он создает потенциал вида

$$V'(x) = V'_0 \delta(x - x_0). \quad (1)$$

Энергетический уровень дефекта в сверхрешетке определяется известным уравнением

$$1 + V'_0 G(x_0, x_0) = 0, \quad (2)$$

где $G(x_0, x_0)$ — одномерная функция Грина идеальной сверхрешетки.

Положение дискретного уровня дефекта в исходной * одномерной решетке определяется аналогичным уравнением

$$1 + V'_0 G_0(x_0, x_0) = 0, \quad (3)$$

где $G_0(x_0, x_0)$ — функция Грина исходной решетки.

Будем считать, что функция Грина исходной идеальной решетки известна. Она и определяет положение уровня дефекта (E_0) в запрещенной зоне согласно уравнению (3). Теперь необходимо вычислить функцию Грина сверхрешетки через функцию G_0 и параметры дополнительного потенциала. В модельной сверхрешетке функция G известна [1]. В интересующем нас случае

$$G(x_0, x_0) = -iG_0(x_0, x_0) \frac{|\sin \beta d|}{\operatorname{sh} \Gamma d} \left| 1 - iV'_0 G_0(x_0, x_0) \frac{2 \sin \beta d \sin \beta(d-x_0)}{\sin \beta d} \right|, \quad (4)$$

где β — квазиволновое число исходной решетки, $d = ma$ — постоянная сверхрешетки, кратная постоянной исходной решетки a , V' — амплитуда δ -образного потенциала сверхрешетки,

$$\operatorname{ch} \Gamma d = |\cos \beta d - iV'_0 G_0(x_0, x_0) \sin \beta d| > 1, \quad iG_0(x_0, x_0) \in \operatorname{Re}.$$

Формула (4) записана для случая, когда энергия E лежит в запрещенных минizonaх разрешенной зоны. В остальных случаях функцию Грина легко найти из выражения (4) с помощью соответствующего аналитического продолжения. Например, в запрещенной зоне следует произвести замену $\beta = i\gamma$, $\gamma > 0$ и $G_0(x_0, x_0) \in \operatorname{Re}$.

Как видно из формул (2) и (4), положение дискретного уровня зависит от местоположения дефекта в слое многослойной структуры. Поскольку в реальном случае мы имеем дело не с одним дефектом, то разные дефекты, находящиеся на разных расстояниях от переходного слоя, будут по-разному смещать исходный уровень E_0 . В промежутке между крайними

* Здесь и далее термин «исходный» употребляется в смысле отсутствия дополнительного потенциала сверхрешетки.

уровнями, соответствующими $x_0=0$ и $x_0=\frac{d}{2}$, будут находиться все остальные уровни, ответственные промежуточным значениям x_0 . Сказанное справедливо в случае, когда в слое находится лишь один дефект. Исследование спектра при наличии в слое более одного дефекта не представляет труда, однако вероятность реализации таких случаев при достаточно малой концентрации дефектов становится сравнительно малой.

Таким образом, для нахождения крайних уровней в запрещенной зоне имеем уравнения

$$1 + V'_0 G_0(0, 0) \frac{\text{sh } \gamma d}{\text{sh } \Gamma d} = 0, \quad (5)$$

$$1 + V'_0 G_0(0, 0) \frac{\text{sh } \gamma d + V'' G_0(1 - \text{ch } \gamma d)}{\text{sh } \Gamma d} = 0,$$

где для простоты считаем, что дефект находится на узле исходной решетки.

Эти уравнения можно упростить в случае не слишком мелкого уровня, а именно, при выполнении условий

$$\gamma a \ll 1, \quad \gamma d \gtrsim 1. \quad (6)$$

Тогда приближенно имеем

$$1 + (V'_0 + V'') G_0(0, 0) = 0, \quad (7)$$

$$2 + [(V'_0 + V'') + V' \sqrt{(V'_0 + V'')^2 + 4 V'_0 V''}] G_0(0, 0) = 0.$$

Уравнения (7), определяющие положения крайних уровней, схожи с уравнением (3), но коэффициенты отличаются. Поскольку зависимость положения дискретного уровня исходной решетки от параметра потенциала дефекта в нашей постановке задачи считается известной, то уравнения (7) по той же зависимости определяют положения крайних уровней. В интересующем нас случае не слишком мелкого уровня* функцию Грина исходной решетки можно заменить на ту же функцию свободного движения с эффективной массой. Таким образом, мы приходим к квадратичной зависимости положения уровня дефекта от параметра потенциала. Тем самым задача об определении крайних уровней полностью решается. Для определения энергий активации необходимо принять во внимание и смещение края соответствующей зоны из-за наличия дополнительного потенциала сверхрешетки.

Для оценок будем считать $V'_0 < 0$ (уровень, как правило, образуется вблизи нижнего края разрешенной зоны) и $V'' \ll |V'_0|$. Тогда без учета смещения края разрешенной зоны для крайних уровней имеем

$$E_1 = E_0 \left(1 - 2 \frac{V'}{|V'_0|} \right), \quad E_2 = E_0 \left(1 - 4 \frac{V''}{|V'_0|} \right). \quad (8)$$

* Во избежание недоразумений подчеркнем, что согласно (6) уровень действительно мелкий в терминах обычных зон, но глубокий в терминах минизон.

Таким образом, дискретный уровень E_0 исходной решетки переходит к набору уровней, причем энергетическое расстояние между крайними уровнями, согласно оценке (8), может быть заметным.

Переходя к исследованию одномерных дискретных уровней в запрещенных минизонах разрешенной зоны, допустим, что исходная решетка идеальная, но дополнительный потенциал сверхрешетки имеет нарушение от идеальности. Поскольку параметр V' считается положительным, то введя обозначения

$$\operatorname{tg} \varphi' = -iV'G_0(x_0, x_0) > 0, \quad t = \frac{V'}{V_0},$$

уравнение (2) с функцией Грина (4) удобно записать в виде

$$\sqrt{\operatorname{ctg} \beta d - \operatorname{ctg} 2\varphi'} = -\frac{t\sqrt{\operatorname{tg} \varphi'}}{\sqrt{2}} \left[1 + \frac{2\operatorname{tg} \varphi' \sin \beta x_0 \sin \beta (d-x_0)}{\sin \beta d} \right]. \quad (9)$$

Запрещенные минизоны в разрешенной зоне занимают область квазиволнового числа β , когда имеет место условие

$$0 < \operatorname{tg} \beta d < \operatorname{tg} 2\varphi'.$$

Как видим, энергетические положения одномерных уровней, определяемые уравнением (9), существенно зависят от местоположения нарушения x_0 . Например, при $x_0=0$ уровень вообще не возникает, если $t>0$. В случае же $t<0$ уровень возникает всегда в каждой запрещенной минизоне. При малых $|t|$ уровень находится вблизи верхнего края запрещенной минизоны. Увеличение параметра $|t|$ смещает уровень до нижнего ее края. Частный случай $t=-1$ соответствует сверхрешетке с «вакансией», т. е. один из слоев имеет удвоенную толщину d .

Таким образом, наличие или отсутствие дискретного уровня в соответствующей запрещенной минизоне в каждом конкретном случае решается однозначно анализом уравнения (9). Для нахождения положений уровней можно было бы уравнение решать графически, но поскольку выбранная модель имеет целью получение результатов качественного характера, то мы ограничиваемся лишь выводами, сделанными выше.

В заключение отметим, что в выбранной модели многослойной структуры учет периодического поля исходной решетки не приводит к трудностям. Как в идеальной сверхрешетке, так и в сверхрешетке с нарушениями энергетический спектр определяется функцией φ' , связанной с функцией Грина исходной решетки при совпадающих аргументах. В области энергий вблизи краев зон функция φ' сильно зависит от энергии, но здесь применимо приближение эффективной массы. В области, далекой от краев зон, φ' слабо зависит от энергии, так что ее можно считать просто характерной константой (см. [1]). В реальном случае дополнительный потенциал сверхрешетки, разумеется, отличается от случая выбранной нами модели. Тем не менее, основные качественные закономерности, видимо, останутся в силе и в общем случае. При существенном изменении потенциала на расстояниях порядка постоянной решетки необходимо явно учитывать периодиче-

ское поле решетки, а рассмотренная нами модель является предельным случаем короткодействующего потенциала.

Автор благодарит В. Л. Бонч-Бруевича за обсуждение работы и ценные замечания.

Ереванский государственный
университет

Поступила 20.I.1975

ЛИТЕРАТУРА

1. Э. А. Касаманян. Изв. АН АрмССР, Физика, 9, 211 (1974).
2. Э. А. Касаманян. ЖЭТФ, 61, 1215 (1971).

ԽԱՆԳԱՐՈՒՄՆԵՐԻ ԷՆԵՐԳԵՏԻԿ ՄԱԿԱՐԴԱԿՆԵՐԸ ՄՈՒԵԼԱՅԻՆ ԲԱԶՄԱՇԵՐՏ ԿԱՌՈՒՅՎԱԾՔՈՒՄ

Ձ. Հ. ԿԱՍԱՄԱՆՅԱՆ

Ուսումնասիրվում է գերցանցի մոդելային միաչափ պարբերական դաշտի ազդեցությունը բյուրեղի խանգարումների էներգետիկ մակարդակի վրա: Ցույց է տրված, որ մեկ մակարդակի փոխարեն առաջանում է մակարդակների խումբ: Ուսումնասիրված են նաև գերցանցի դաշտի պարբերականությունից շեղման պատճառով թույլատրելի դոտու արգելված միջի-դոտիներում առաջացած միաչափ էներգետիկ մակարդակները:

ENERGY LEVELS OF DISTURBANCES IN MODEL MULTILAYER PERIODIC STRUCTURES

Z. H. KASAMANYAN

The influence of one-dimensional periodic field of a superlattice on the discrete energy level of defects in a crystal is investigated. It is shown that instead of one level a set of levels is formed. One-dimensional discrete levels which arise in the forbidden minizones of the allowed zone due to the disturbance of the periodicity of the superlattice potential are also investigated.