

О КОНТАКТНЫХ УРОВНЯХ НА ГРАНИЦЕ  
РАЗДЕЛА ДВУХ ИДЕАЛЬНЫХ ПОДСИСТЕМ

А. Т. ДАРБАСЯН, Э. А. КАСАМАНЯН

Исследование локализованных состояний, возникающих на границе раздела двух сред, является важной задачей, представляющей практический интерес. Подобные задачи возникают в теории поверхностных состояний, когда поверхность кристалла покрыта диэлектрической пленкой окисных соединений, при исследовании контактных уровней в гетеропереходах и т. д. В этих системах в общей запрещенной зоне обеих идеальных подсистем могут возникнуть контактные уровни\*, которые в определенных условиях могут играть существенную роль. Если эти уровни глубокие, то из-за сравнительно большой концентрации (порядка  $10^{14} \div 10^{15} \text{ см}^{-2}$ ) они могут быть эффективными центрами генерации, рекомбинации или прилипания.

Исследование контактных уровней в гетеропереходах проведено, например, в работе [1] на основе модели Кронига-Пенни для кристаллического потенциала. Мы здесь рассмотрим общий случай произвольного одномерного периодического потенциала и получим качественный вывод в случае, когда подсистемы имеют разные постоянные решетки.

Для последовательного рассмотрения возможности возникновения контактных уровней и определения их положения в общей запрещенной зоне запишем соответствующее уравнение через функции Грина отдельных подсистем [2] ( $\hbar = 2m_0 = 1$ )

$$\frac{1 + \frac{\partial}{\partial x_1} G_1(x_1, x_1)}{G_1(x_1, x_1)} = \frac{-1 + \frac{\partial}{\partial x_2} G_2(x_2, x_2)}{G_2(x_2, x_2)}, \quad (1)$$

где  $x_1$  — расстояние от контактной точки до ближайшего узла левой подсистемы,  $(a_2 - x_2)$  — соответственно правой подсистемы ( $a_1, a_2$  — постоянные решетки).

Сначала допустим, что обе подсистемы вместе составляют одну идеальную систему; тогда в запрещенной зоне нет дискретных состояний. Это обстоятельство позволяет несколько дополнить сведения относительно поведения функций в уравнении (1), рассмотренного в [2].

Результат можно представить в наглядной схематической форме (см. рисунок), где для простоты рассматривается запрещенная зона, следующая за первой разрешенной. Пунктирными линиями изображен график правой

\* Мы рассматриваем одномерную задачу. При переходе к трехмерному случаю при определенных предположениях вместо уровня будем иметь двумерную подзону.

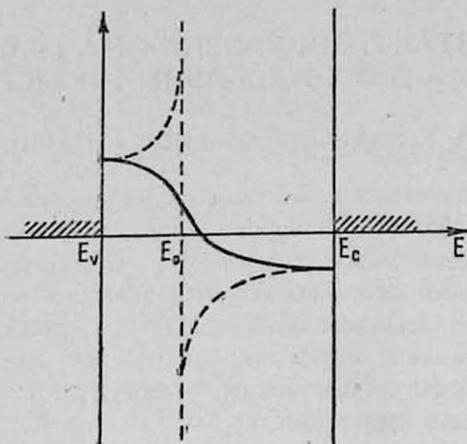


Рис. 1.

части уравнения как функция энергии при фиксированном значении параметра  $x_1$ , сплошными линиями — левой части уравнения (1). При энергии  $E=E_0$  правая часть имеет бесконечный разрыв ( $E=E_0$  соответствует поверхностному уровню в модели бесконечно высокой потенциальной стенки).

Изменение параметра  $x_1$  в пределах  $0 < x_1 < \frac{a_1}{2}$  перемещает положение  $E_0$

от нижнего до верхнего края данной запрещенной зоны, затем при  $\frac{a_1}{2} < x_1 < a_1$  разрыв имеет уже левая часть уравнения (1), а правая больше не имеет. Важным свойством этого семейства графиков является то, что пересечение возможно лишь на краях зоны.

Доказательство равенства левой и правой частей уравнения (1) на краях зон тривиально, если принять во внимание общее свойство одномерной функции Грина в периодическом поле, а именно, что она на краях зон, вообще говоря, имеет особенность типа  $(E-E_c)^{-\frac{1}{2}}$  (см. [3]).

Рассмотрим теперь случай, когда деформируется одна ячейка приконтактной области. При увеличении расстояния между двумя соседними атомами при неизменном потенциале в запрещенной зоне возникает один единственный уровень, причем он отщепляется от верхней разрешенной зоны и опускается по запрещенной зоне по мере увеличения этого расстояния.

Теперь увеличим постоянную решетки правой подсистемы, оставляя потенциал неизменным. Очевидно, виртуальные уровни в каждой из ям правой подсистемы опускаются, запрещенная зона становится уже, края этой зоны также опускаются. При неизменном положении контактной точки относительно левой подсистемы параметр  $x_2$  увеличивается, асимптота удаляется от нижнего края запретной зоны и одновременно уменьшается значение правой части уравнения (1) на новом нижнем краю. Таким образом, имеет место обязательное (и причем здесь единственное) пересечение кривых ле-

вой и правой частей уравнения (1). Следовательно, в этом случае также возникает один уровень в общей запрещенной зоне двух подсистем, причем этот уровень отщепляется от нижней разрешенной зоны.

Последовательное рассмотрение требует, чтобы были приняты во внимание оба вышеуказанных обстоятельства одновременно, так как длину граничной ячейки разумнее всего считать полусуммой постоянных решеток правой и левой подсистем. Это может привести к появлению уже двух состояний в общей запрещенной зоне.

Итак, мы имеем доказательство возможности возникновения двух контактных уровней на границе раздела идеальных одномерных подсистем, причем периодический потенциал никак не конкретизируется. Подобные контактные уровни могут возникнуть также в полупроводниках, находящихся под высоким анизотропным давлением. Возникающие здесь уровни, видимо, должны быть глубокими и могут быть теми уровнями, которые необходимы в вероятном объяснении возникновения отрицательного дифференциального сопротивления [4].

Ереванский государственный университет

Поступила 21.II.1976

ЛИТЕРАТУРА

1. М. М. Русанов. Письма ЖТФ, 1, 216 (1975).
2. Э. А. Касаманян. Изв. АН АрмССР, Физика, 11, 436 (1976).
3. Э. А. Касаманян. ЖЭТФ, 69, 281 (1975).
4. Г. М. Авакьянц, Э. Г. Меликян. ФТП, 6, 2232 (1972).

ԵՐԿՈՒ ՊԱՐԲԵՐԱԿԱՆ ԵՆԹԱՍԻՍՏԵՄՆԵՐԻ ԲԱԺԱՆՄԱՆ ՍԱՀՄԱՆԻՆ  
ԿՈՆՏԱԿՏԱՅԻՆ ՄԱԿԱՐԳԱԿՆԵՐԻ ԱՌԱՋԱՑՄԱՆ ՄԱՍԻՆ

Ա. Տ. ԴԱՐԲԱՍՅԱՆ, Զ. Հ. ԿԱՍԱՄԱՆՅԱՆ

*Ուսումնասիրվում է կոնտակտային մակարդակների առաջացման հնարավորությունը, երբ ենթասխտանները ունեն ցանցի տարբեր հաստատուններ: Ցույց է տրված, որ այստեղ առաջանում են երկու կոնտակտային մակարդակներ անկախ պարբերական պոտենցիալի բացահայտ տեսքից:*

ON THE CONTACT LEVELS ON THE BORDER OF TWO IDEAL SUBSYSTEMS

A. T. DARBASYAN, Z. H. KASAMANYAN

The possibility for the rise of contact levels is investigated for the case where the subsystems have different lattice constants. Two contact levels are shown to be formed irrespective of the specific form of one-dimensional periodic potential.