

ПОВЕРХНОСТНЫЕ СОСТОЯНИЯ В УЛУЧШЕННОЙ МОДЕЛИ ПОТЕНЦИАЛА ПОВЕРХНОСТИ

А. А. ВАРДАНЯН, З. А. КАСАМАНЯН

Анализируются недостатки модели скачкообразного изменения потенциала поверхности при исследовании локализованных состояний. При сшивании произвольного одномерного периодического потенциала с плавным потенциалом поверхности доказывалось, что число и положение локализованных состояний зависят как от эффективной длины падения потенциала поверхности, так и от его конкретной формы. Для характерных значений параметров задачи в запрещенной зоне возникает, как правило, один или два уровня.

В предыдущей работе одного из авторов [1] было показано, что в идеализированной модели поверхности, когда ее потенциал аппроксимируется в виде скачка, положение поверхностного уровня существенно зависит от параметра положения скачка в пределах постоянной решетки. Этот вывод является общим и не зависит от конкретного вида периодического поля. С другой стороны, такая модель в одномерном случае позволяет получить в каждой запрещенной зоне не более одного уровня. Техника, развитая в [1], доказывает также возможность возникновения второго уровня в каждой запрещенной зоне, если только принимается во внимание нарушение от идеальности потенциала вблизи поверхности. Отметим, что двухуровневая схема поверхностных состояний отчетливо проявляется в некоторых кристаллах, если измерения проводятся в сверхвысоком вакууме (см. обзор [2]). Однако в тех же кристаллах методом отражения медленных электронов удается показать, что потенциал решетки вблизи поверхности отклоняется от периодического. В реальных условиях потенциал поверхности падает достаточно медленно (порядка нескольких постоянной решетки), так что модель скачка потенциала из-за указанной выше чувствительной зависимости нуждается в улучшении.

Необходимость изучения одномерного случая в теории поверхностных состояний диктуется тем, что в настоящее время делается много попыток согласовать теоретические и экспериментальные данные уточнением трехмерных расчетов с использованием псевдопотенциалов и применением вычислительной техники. Но такие результаты будут, в лучшем случае, малоэффективными, если эти уточнения касаются лишь идеального периодического поля решетки. По существу, не существует единой качественной картины о числе возможных поверхностных подзон в трехмерном случае даже в модели скачка потенциала (ср. [3, 4] с [5, 6]). Нет также единого мнения о влиянии конечного наклона потенциала поверхности на число и положение уровней (ср. [4] с [7]). Поэтому последовательное рассмотрение одномерного случая позволит выяснить качественную картину хотя бы в тех ситуациях, когда трехмерное поле допускает разделение переменных (точное или приближенное).

Изменение наклона и формы потенциала поверхности может играть важную роль при определении числа и положения поверхностных уровней. Хотя модель конечного наклона потенциала поверхности применяется не впервые (см., напр., [7, 8]), ее принципиальная роль в общем случае должным образом еще не исследована. Так, например, в [8] потенциал поверхности с конечным наклоном сшивается с максимумом периодического потенциала. Если сшивание провести с произвольной точкой периодического потенциала, то выводы существенно меняются. Последний случай, который нами будет рассматриваться, является хорошей моделью учета искажения приграничной ячейки.

Мы рассмотрим одномерный случай, когда потенциал задается в следующем виде:

$$V(x) = \begin{cases} V_0, & x < x_1 \\ V_1(x), & x_1 < x < x_0 \\ V_2(x), & x > x_0, \end{cases} \quad (1)$$

где V_0 — постоянный потенциал вакуума, $V_2(x)$ — произвольный одномерный периодический потенциал. В переходной области потенциал будем задавать в одной из следующих форм ($\hbar = 2m_0 = 1$):

$$V_1(x) = \frac{V_0}{x_1 - x_0} (x - x_0), \quad (2)$$

или

$$V_1(x) = \frac{V_0}{(x_1 - x_0)^2} (x - x_0)^2. \quad (3)$$

Воспользуемся теперь техникой [1], когда уравнение, определяющее поверхностные состояния, записывается с помощью функций Грина. Этот формализм позволяет делать общие качественные выводы без специализации периодического потенциала $V_2(x)$. Исследуемая нами система разбивается на три участка. Для этого случая нетрудно обобщить формализм работы [1]. Однако в случае, когда расстояние $|x_1 - x_0|$ превышает радиус локального состояния (именно тогда необходимо отказаться от модели стенки), в пренебрежении экспоненциально малыми членами можно ограничиться задачей двух контактирующих подсистем и воспользоваться сразу уравнением для этого случая

$$\frac{1 + \frac{\partial}{\partial x_0} G_1(x_0, x_0)}{G_1(x_0, x_0)} = \frac{-1 + \frac{\partial}{\partial x_0} G_2(x_0, x_0)}{G_2(x_0, x_0)}. \quad (4)$$

Здесь в левой части фигурирует функция Грина электрона в электрическом поле (2) или в поле осциллятора (3), а в правой — в периодическом поле. Уравнение (4) можно записать также через волновые функции, если только энергия E принимает значения в разрешенной части спектра данной подсистемы. В запрещенной части спектра периодического потенциала мож-

но было бы провести аналитическое продолжение волновых функций из непрерывной разрешенной зоны. Тем не менее оказывается удобным использовать формализм функций Грина, которые имеют изученные аналитические свойства [9]. Это, в частности, позволяет легко представить график зависимости правой части уравнения (4) от энергии E и параметра x_0 (см. рис. 1).

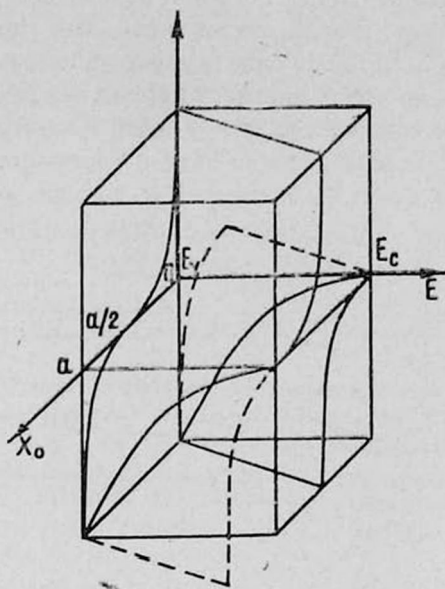


Рис. 1.

В модели (2) для переходной области левая часть выражается через логарифмическую производную функции Эйри. Изменением положения контактной точки x_0 относительно первого узла решетки можно проследить за изменением положения поверхностного уровня в запрещенной зоне для различных значений параметра наклона поверхностного потенциала. В итоге оказывается, что уменьшение наклона приводит к менее чувствительной зависимости положения уровня в запрещенной зоне от параметра x_0 . Одновременно начинается образование второго, третьего и т. д. уровней в каждой запрещенной зоне.

В модели (3) переходной области в левой части уравнения (4) фигурирует функция Грина электрона в поле осциллятора. Явный ее вид можно получить из билинейного разложения (см. также [10], стр. 77). Можно показать, что

$$\frac{\partial}{\partial x_0} G_1(x_0, x_0) = 0, \quad G_1(0, 0) = -\frac{1}{\sqrt{2}\omega} \frac{\Gamma\left(1 - \frac{\nu}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2} - \frac{\nu}{2}\right)},$$

где $\nu = E/\omega - 1/2$, $\Gamma(x)$ — известная гамма-функция.

Как и в предыдущем случае, уменьшение наклона поверхностного потенциала приводит к образованию нового уровня в каждой запрещенной зоне. Если в данной запрещенной зоне сначала имеется один уровень, то при уменьшении наклона он постепенно опускается с одновременным появлением второго уровня в верхней части этой зоны. Итак, мы приходим к ситуации, характерной для эксперимента, когда имеются донорно-акцепторные пары уровней. Для разумных значений параметров задачи ($V_0 \approx 5$ эв, $|x_1 - x_0| = 10 \div 20$ Å) во второй запрещенной зоне оказывается возможным существование, как правило, одного или двух поверхностных уровней.

Для наглядности на рис. 2 приведен пример, когда периодическое поле учитывается в простой модели Кронига—Пенни. Изменение контактной точки x_0 в пределах постоянной решетки хотя и перемещает уровень до 20% ширины запрещенной зоны, но не по всей ее ширине, как это имеет место в модели скачка.

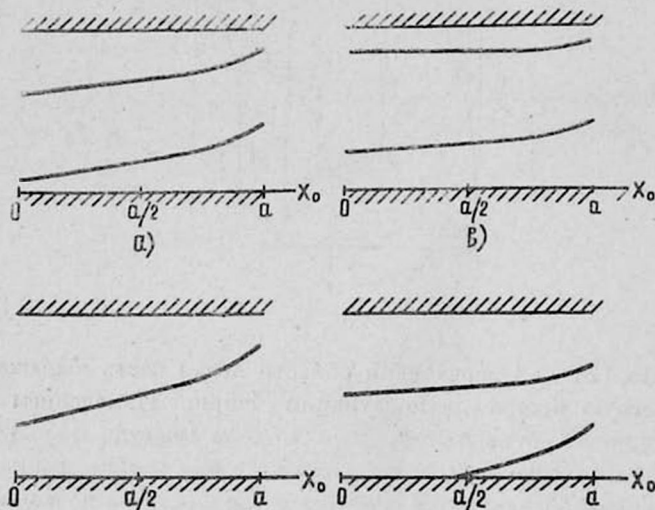


Рис. 2. Зависимость положения поверхностных уровней во второй запрещенной зоне от параметра x_1 в модели Кронига—Пенни: а) $x_1 = 4a$, б) $x_1 = 2a$ в модели (2); в) $x_1 = 3a$, г) $x_1 = 2a$ в модели (3).

Таким образом, модель плавного изменения поверхностного потенциала дает удовлетворительную качественную картину о числе поверхностных состояний и наглядно показывает необходимость отказа от модели скачка потенциала на поверхности, если возникающие в запрещенной зоне поверхностные уровни глубокие. Кроме того, положение поверхностного уровня зависит не только от эффективной длины падения потенциала поверхности $|x_1 - x_0|$, но и от его конкретной формы (в нашем случае модель (2) или (3)).

ЛИТЕРАТУРА

1. Э. А. Касаманян. Изв. АН АрмССР, Физика, 11, 436 (1976).
2. С. Дэвисон, Дж. Левин. Поверхностные (таммовские) состояния, Изд. Мир, 1973.
3. В. Е. Степанов, В. А. Чалдышев. ФТТ, 12, 1671 (1970).
4. N. Garcia. Sol. State. Comm., 17, 397 (1975).
5. M. Ellices et al. J. Phys., C7, 3020 (1974).
6. J. Pendry, S. Gurram. Surf. Sci., 49, 87 (1975).
7. J. Rubio, F. Flores. An. fis. Real. Soc., esp. fis. y quim, 70, 316 (1974).
8. A. A. Cotter. J. Phys., C8, 2446 (1973).
9. Э. А. Касаманян. ЖЭТФ, 69, 281 (1975).
10. Р. Фейнман, А. Хибс. Квантовая механика и интегралы по траекториям, Изд. Мир, 1968.

ՄԱԿԵՐԵՎՈՒՅԹԱՅԻՆ ՎԻՃԱԿՆԵՐԸ ԲԱՐԵԼԱՎՎԱԾ ՄԱԿԵՐԵՎՈՒՅԹԱՅԻՆ
ՊՈՏԵՆՑԻԱԼՈՎ ՄՈԴԵԼԻՄ

Ա. Հ. ՎԱՐԴԱՆՅԱՆ, Զ. Հ. ԿԱՍԱՄԱՆՅԱՆ

Քննարկվում են թույլբաձև մակերևութային պոտենցիալի մոդելի թերությունները լոկալիզացված վիճակների ուսումնասիրման ժամանակ: Ապացուցվում է, որ կամայական միաչափ պարբերական պոտենցիալի և սահուն փոփոխվող մակերևութային պոտենցիալի կարման ժամանակ լոկալիզացված վիճակների թիվը և դիրքը կախված է ինչպես պոտենցիալի անկման էֆեկտիվ երկարությունից, այնպես էլ նրա կոնկրետ ձևից: Խնդրի պարամետրերի բնութագրական արժեքների համար արգելված գոտում առաջանում են որպես կանոն մեկ կամ երկու մակարդակներ:

SURFACE STATES IN THE IMPROVED MODEL
OF SURFACE POTENTIAL

A. H. VARDANYAN, Z. H. KASAMANYAN

The deficiencies of the surface potential jump model for the investigation of localized states are analyzed. It is shown that when matching an arbitrary one-dimensional periodic potential and the smooth surface potential the number and position of localized states depend on both the effective length of the potential drop and the specific form of the surface potential. At characteristic values of parameters one or two levels are shown to usually arise in the forbidden band.