

О ПОГЛОЩЕНИИ СВЕТА В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ТОНКИХ ПЛЕНКАХ С УЧАСТИЕМ ПОВЕРХНОСТНЫХ СОСТОЯНИЙ

С. Х. БАРСЕГЯН, Э. А. КАСАМАНЯН

Показано, что в условиях сверхвысокого вакуума следует ожидать возникновения полосы до края собственного поглощения. В обычных условиях из-за случайного распределения поверхностных уровней по всей запрещенной зоне полоса может существенно искажаться.

Соображения о смещении края собственного поглощения в полупроводниковых тонких пленках в область высоких частот [1] не учитывают возможность возникновения поверхностных состояний в запрещенной зоне. Этот эффект является следствием размерного квантования, приводящего к сужению разрешенных зон и увеличению ширины запрещенной зоны. С другой стороны, наличие границ тонкой пленки может привести к уменьшению общего числа состояний в разрешенных зонах и возникновению таммовских поверхностных состояний в запрещенной зоне. Например, в модели [2] это уменьшение составляет одну двумерную подзону, которая переходит в область запрещенной зоны.

Следует предположить, что в общем случае смещение края собственного поглощения может сопровождаться возникновением полосы поглощения в области меньших частот, если переходы с поверхностных состояний в зону (или наоборот) не запрещены правилами отбора. Наличие таких состояний может иногда существенно сказаться на термодинамических, кинетических и других свойствах тонкой пленки. Между тем в ряде работ (см., например, [3—6]), где получены экспериментальные подтверждения смещения края поглощения, поверхностные состояния и соответствующие полосы не обнаруживаются. Это, по-видимому, связано с почти равномерным распределением собственных поверхностных состояний по всей запрещенной зоне. Для наблюдения таких состояний, по-видимому, необходимо как выращивание тонкой пленки, так и измерения проводить в условиях сверхвысокого вакуума. Экспериментальные данные по тонким пленкам полуметаллов [7] убедительно указывают на существенное различие результатов в обычных условиях и в условиях сверхвысокого вакуума. Более того, результаты в последнем случае удается удовлетворительно объяснить при учете состояний на несмещенном крае зоны [7, 8]. Эти состояния по существу имеют поверхностное происхождение [2].

В полупроводниковых тонких пленках в условиях сверхвысокого вакуума возможность существования поверхностных состояний можно было бы исследовать оптическими методами. В связи с этим представляет интерес рассмотреть оптические переходы с участием по-

верхностных состояний. Для простоты будем рассматривать модель кристалла с разделяющимися переменными вдоль плоскости пленки и в перпендикулярном направлении. Это позволяет провести исследование энергетического спектра в одномерном случае. Если считать условия на границах симметричными, то волновые функции в направлении, перпендикулярном к плоскости пленки, имеют вид

$$\varphi_{\mp}(x) = C[G(x, x_1) \mp G(x, x_2)], \quad (1)$$

где G — одномерная функция Грина, учитывающая произвольное одномерное периодическое поле внутри пленки. В случае достаточно глубокой потенциальной ямы вне границ тонкой пленки волновые функции падают сравнительно быстро, и вклад в матричный элемент, входящий в коэффициент поглощения, от этих областей будет пренебрежимо мал. По этой причине как вычисление матричного элемента, так и нормировку волновой функции можно провести в области тонкой пленки $d = x_2 - x_1$.

Рассмотрим теперь переходы из поверхностных состояний, находящихся в запрещенной зоне вблизи края валентной зоны, в нижележащие подзоны разрешенной зоны. Тогда одномерные блоховские функции, входящие в формулу (1), можно считать постоянными и пользоваться просто приближением эффективной массы. Именно для таких состояний возможно приближенное разделение переменных, принятое нами как основное допущение. Таким путем мы получаем простые одномерные волновые функции в разрешенных зонах:

$$\varphi_{-}(x) = \frac{2\sqrt{k_i}}{\sqrt{\sin 2k_i d - 2k_i d}} \sin k_i x, \quad i = 1, 2, \dots, \quad (2a)$$

$$\varphi_{+}(x) = \frac{2\sqrt{k_i}}{\sqrt{\sin 2k_i d + 2k_i d}} \cos k_i x. \quad (2b)$$

Аналогично в запрещенной зоне идеального кристалла имеем

$$\varphi_{0^{-}}(x) = \frac{2\sqrt{\gamma}}{\sqrt{\operatorname{sh} 2\gamma d - 2\gamma d}} \operatorname{sh} \gamma x, \quad (3a)$$

$$\varphi_{0^{+}}(x) = \frac{2\sqrt{\gamma}}{\sqrt{\operatorname{sh} 2\gamma d + 2\gamma d}} \operatorname{ch} \gamma x. \quad (3b)$$

В отличие от модели бесконечно-глубокой потенциальной ямы значения k_i в (2a) определяются не выражением $\pi n/d$ ($n = 1, 2, \dots$), а решением соответствующего дисперсионного уравнения, определяющего положения пленочных уровней как в разрешенной, так и в запрещенной зоне. Для нашей цели достаточно лишь указать, что значения k_i при вариации граничных условий лежат в интервалах

$$0 < k_1 < \frac{\pi}{d}, \quad \frac{\pi}{d} < k_2 < \frac{2\pi}{d} \quad \text{и т. д.}$$

Положения уровней в запрещенной зоне, определяемые величиной γ ($\gamma \sim \sqrt{E_v - E}$ вблизи валентной зоны), при аналогичных вариациях меняются существенно. Есть и такие случаи, когда уровень совпадает с краем зоны идеального кристалла (ср. с [8]), т. е. вообще отсутствует смещение края соответствующей зоны.

Далее вычисление коэффициента поглощения проводится стандартным способом (см., например, [9]). Если для поверхностной подзоны выбрать закон дисперсии в простейшем приближении (см. [10], § 12)

$$E_0(k_{\perp}) = E_0 - \frac{\hbar^2 k_{\perp}^2}{2m^*},$$

в итоге можно получить

$$a_{0 \rightarrow c_j} = \frac{256 e^2 \pi^2 \gamma f_{0c} n(\omega) \mu^*}{m_0 \varepsilon c_0 d (\operatorname{sh} 2\gamma d - 2\gamma d)} \times \quad (4)$$

$$\times \frac{k_j}{2k_j d - \sin 2k_j d} \left[\frac{2\gamma}{k_j^2 + \gamma^2} \sin k_j d \operatorname{ch} \gamma d + \frac{2k_j}{k_j^2 + \gamma^2} \cos k_j d \operatorname{sh} \gamma d \right]^2,$$

$$a_{v \rightarrow c_j} = \frac{256 e^2 \pi^2 \gamma f_{0c} n(\omega) \mu^*}{m_0 \varepsilon c_0 d (\operatorname{sh} 2\gamma d + 2\gamma d)} \times \quad (4a)$$

$$\times \frac{k_j}{2k_j d - \sin 2k_j d} \left[\frac{2k_j}{k_j^2 + \gamma^2} - \frac{2k_j}{k_j^2 + \gamma^2} \cos k_j d \operatorname{ch} \gamma d - \frac{2\gamma}{k_j^2 + \gamma^2} \sin k_j d \operatorname{sh} \gamma d \right]^2,$$

где $n(\omega)$ — показатель преломления, $\mu^{-1} = m^{*-1} + m_c^{-1}$, m_0 — масса свободного электрона, m_c и m_v — эффективные массы, ε — диэлектрическая проницаемость, c_0 — скорость света, d — толщина пленки, f_{0c} — сила осциллятора, связанная с двумерными функциями Блоха.

Для сравнения приведем также результат для междузонных переходов ($\mu^{-1} = m_v^{-1} + m_c^{-1}$):

$$a_{v_i \rightarrow c_j} = \frac{256 \pi^2 e^2 n(\omega) \mu f_{vc}}{m_0 \varepsilon d c_0} \frac{k_i}{\sin 2k_i d - 2k_i d} \times \quad (5)$$

$$\times \frac{k_j}{\sin 2k_j d - 2k_j d} \left[\frac{\sin d(k_i + k_j)}{k_i + k_j} - \frac{\sin d(k_i - k_j)}{k_i - k_j} \right]^2.$$

Легко видеть, что отношение $a_{0 \rightarrow c} / a_{v \rightarrow c}$ всегда меньше единицы, но по величине $a_{0 \rightarrow c}$ может быть вполне достаточным для экспериментального наблюдения. При приближении уровня к краю валентной зоны, что достигается вариацией граничных условий, коэффициент поглощения $a_{0 \rightarrow c}$ увеличивается, и в пределе $\gamma d \rightarrow 0$ ($k = \pi/d$) имеем

$$a_{0 \rightarrow c} = \frac{8\mu^*}{\pi^2 \mu} a_{v \rightarrow c}.$$

В заключение следует отметить, что полученные здесь простые качественные формулы относятся к случаю, когда отсутствуют шеро-

ховатости поверхности. Учет этого обстоятельства приводит к распределению уровней по запрещенной зоне. При последовательном рассмотрении необходимо произвести усреднение коэффициента поглощения по заданному распределению уровней, что может привести к существенному искажению этой полосы, если распределение не имеет более или менее хорошо определенного максимума.

Ереванский политехнический институт
им. К. Маркса

Ереванский государственный университет

Поступила 27.XII.1976

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. В. Б. Сандомирский. ЖЭТФ, 43, 2309 (1962).
2. З. А. Касаманян. Изв. вузов, Физика, № 5, 7 (1977).
3. О. Н. Филаатов, И. А. Карпович. ФТТ, 10, 2835 (1968).
4. А. Г. Стасенко. ФТТ, 10, 248 (1968).
5. Н. Н. Салащенко и др. ФТТ, 17, 3641 (1975).
6. О. Н. Филаатов, Н. Н. Салащенко, М. М. Кециев. ФТТ, 17, 2105 (1975).
7. N. Garcia, J. H. Kao, M. Strongin. Phys. Rev., B5, 2029 (1972).
8. A. Paskin, A. Singh. Phys. Rev., 140, 1965 (1965).
9. В. Г. Колян, В. З. Кресин. ФТТ, 11, 3230 (1969).
10. С. Дэвисон, Дж. Левин. Поверхностные (таммовские) состояния, Изд. Мир, М 1973.

ԼՈՒՅՍԻ ԿՎԱՆՈՒՄԸ ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴՉԱՅԻՆ ԲԱՐԱԿ ԹԱՂԱՆԹՆԵՐՈՒՄ
ՄԱԿԵՐԵՎՈՒՅՑՅԻՆ ՎԻՃԱԿՆԵՐԻ ԱՌԿԱՅՈՒԹՅԱՆ ԴԵՊՔՈՒՄ

Ս. Խ. ԲԱՐՍԵԳՅԱՆ, Զ. Հ. ԿԱՍԱՄԱՆՅԱՆ

Ցույց է տրված, որ դերբարձր վակուումի պայմաններում մինչև սեփական կլանման եզրը հնարավոր է կլանման շերտի առաջացում: Սովորական պայմաններում՝ ամբողջ արդելված զտու սահմաններում մակերևութային վիճակների պատահական բաշխման հետևանքով այդ շերտը կարող է էսպես աղավաղվել:

ON THE ABSORPTION OF LIGHT IN THIN SEMICONDUCTOR FILMS WITH SURFACE STATES

S. Kh. BARSEGYAN, Z. H. KASAMANYAN

It is shown that under superhigh vacuum conditions the absorption strip up to the fundamental absorption boundary can arise. Under the ordinary conditions due to the accidental distribution of surface states over the whole forbidden band the strip could be essentially distorted.