Изв. АН Армянской ССР, Физика, 14, 185–191 (1979)

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР ДЕФЕКТОВ В ОДНОМЕРНОЙ ПЕРИОДИЧЕСКОЙ СИСТЕМЕ

З. А. КАСАМАНЯН, С. М. МОВСИСЯН, В. М. ГАСПАРЯН

Развита строгая теория энергетических уровней в одномерном случае. Дается также формулировка задачи на языке псевдопотенциалов. Для конкретных моделей резкого изменения потенциала дефекта найдены соответствующие псевдопотенциалы. Обсуждается вопрос о зависимости положения уровня от конкретной формы потенциала. Показано, что есть случаи, когда возникают нестандартные мелкие уровни.

В настоящее время является общепринятой точка зрения о том, что теория мелких уровней дефектов в полупроводниках находится в удовлетворительном состоянии. Поскольку теория глубоких уровней в реальном случае встречается с большими трудностями, то естественно прибегать к модельным задачам. Так, например, задача о дефекте в одномерной модели Кронига-Пенни дает точное решение [1], причем оказывается, что энергетические уровни в запрещенной зоне вблизи верхнего края разрешенной зоны обладают некоторыми особенностями. В частности, возникает нестандартная зависимость радиуса локального состояния от энергии, отсчитанной от верхнего края разрешенной зоны [2].

Принято также считать, что дефекты в периодической системе при достаточно малой концентрации могут привести к возникновению дискретных уровней в запрещенной зоне, а влияние их на разрешенные зоны можно не учитывать. Состояния, возникающие в запрещенной зоне, казалось бы, отщеплены от области вблизи края соответствующей зоны, если имеем дело с мелкими уровнями. Между тем полученное в [1] решение, позволяющее в модельном случае исследовать структуру спектра в целом, подтверждает это предположение далеко не всегда. В методическом отношении интересной является сама по себе возможность построения строгой и последовательной теории уровней дефектов хотя бы в одномерном случае. Дополнительные модельные предположения в дальнейшем нами принимаются во внимание для иллюстративных целей и для исследования отдельных вопросов. Основное внимание уделяется поведению энергетического спектра в резко меняющихся полях, когда метод огибающих волновых функций становится неприменимым.

1. Рассмотрим одномерную систему, являющуюся идеально периодической кроме области $x_1 < x < x_2$ (эту область обозначим как подсистему II), где предполагается произвольный пока потенциал. Для наших целей достаточно лишь знание общих свойств функции Грина в одномерном периодическом поле, и потому нет необходимости прибегать к модели. Энергетический спектр такой трехслойной структуры определяется уравнением [3]:

$$D(E) = 1 - \lambda r_{12} r_{23} = 0, \tag{1}$$

где

$$r_{12}=\frac{G_2(x_1x_1)\,G_1'(x_1-0,\,x_1)-G_1(x_1x_1)\,G_2'(x_1-0,\,x_1)}{G_2(x_1x_1)\,G_1'(x_1-0,\,x_1)-G_1(x_1x_1)\,G_2'(x_1+0,\,x_1)},$$

$$r_{23}=\frac{G_1(x_2x_2)\,G_2'(x_2+0,\,x_2)-G_2(x_2x_2)\,G_1'(x_2+0,\,x_2)}{G_1(x_2x_2)\,G_2'(x_2-0,\,x_2)-G_2(x_2x_2)\,G_1'(x_2+0,\,x_2)},$$

$$\lambda=G_2(x_1x_2)\,G_2(x_2x_1)\,[G_2(x_1x_1)\,G_2(x_2x_2)]^{-1},$$

G_1 — функция Грина бесконечной периодической системы, G_2 — функция Грина для произвольного потенциала. Наличие разрыва у производной функции Грина, например, по первому аргументу при совпадающих координатах $\left(G(x_1\mp 0,\,x_1)=\frac{\partial}{\partial x}G(x,\,x_1)|_{x\to x_1\mp 0}\right)$ делает необходимым отличать левосторонние и правосторонние производные.

Волновые функции, соответствующие дискретным значениям энергии в запрещенной зоне идеальной периодической системы (подсистемы I), имеют вид

$$\varphi_1(x)=AG_1(x,\,x_1)\quad\text{при}\quad x<x_1\quad\text{и}\quad x>x_2, \tag{2}$$

$$\varphi_2(x)=BG_2(x,\,x_1)+CG_2(x,\,x_2)\quad\text{при}\quad x_1<x<x_2. \tag{3}$$

Из вида (2) непосредственно следует, что волновая функция вне области дефекта имеет сложный осциляционный вид, но ее огибающая экспоненциально падает по мере удаления из этой области. Радиус локального состояния есть γ^{-1}, где γ—аналитически продолженное из разрешенной зоны в запрещенную квазиволновое число ($\gamma=-ik$).

Таким образом, исследование энергетического спектра одномерной периодической системы при наличии дефекта сводится к решению уравнения (1), где функции Грина G_1 и G_2 должны находиться из решения самостоятельных независимых задач с заданными потенциалами и соответствующими им граничными условиями в бесконечности. Однако нахождение явного вида функции Грина является трудной и не всегда разрешимой задачей. Тем не менее она обладает известными аналитическими свойствами, что облегчает исследование уравнения (1). Таким путем, оказывается, можно получить нетривиальные качественные выводы.

2. Хотя исследование уравнения (1) можно провести и в общем виде, но для простоты удобно рассмотреть случай, когда контактные точки x_1 и x_2 находятся в совершенно симметричных условиях. Это означает выполнение равенств ($j=1,2$)

$$G_j(x_1x_1)=G_j(x_2x_2);\;G_j'=\frac{\partial}{\partial x_1}G_j(x_1x_1)=-\frac{\partial}{\partial x_2}G_j(x_2x_2),\;r_{12}=r_{23}, \tag{4}$$

что позволяет значительно упростить уравнение (1) ($\hbar=2m=1$):

$$\frac{1+G_1'}{G_1}=\frac{G_2'-\left[\operatorname{th}\frac{\varkappa d}{2}\right]^{\pm 1}}{G_2}, \tag{5}$$

$$\frac{1+G_1'}{G_1} = \frac{G_2' - \left[i \operatorname{tg} \frac{kd}{2}\right]^{\pm 1}}{G_2}, \tag{6}$$

где

$$d = x_2 - x_1, \quad \varkappa = \frac{1}{d}\int\limits_{x_1}^{x_2} \frac{dx}{2\, G_2(x,\ x)} = -ik.$$

В итоге для определения энергетических уровней в запрещенной зоне I подсистемы в силу симметричных условий имеем два уравнения (5) в запрещенной области и два уравнения (6) в разрешенной области спектра II подсистемы. При этом качественная зависимость левых частей уравнений как функция энергии и параметра x_1 в случае произвольного периодического потенциала нам известна (см. [4]). Теперь задача сводится к нахождению правых частей при конкретной форме потенциала II подсистемы.

Важно отметить, что информации о периодическом поле и потенциале дефекта входят сюда независимо, что позволяет также сформулировать задачу на языке псевдопотенциалов. Для этой цели удобно представить уравнения (5) и (6) в виде

$$1 + V(E)\frac{G_1}{1 \mp G_1'} = 0, \tag{7}$$

напоминающем уравнение в модели δ-образного потенциала дефекта

$$1 + VG_1 = 0. \tag{7a}$$

Псевдопотенциалы дефекта $V(E)$, являющиеся действительными величинами, помимо конкретного вида истинного потенциала зависят и от энергии. Здесь мы имеем возможность, как это принято говорить, найти псевдопотенциалы, «исходя из первых принципов». Для этого необходимо определить функцию Грина $G_2(x,\ x;\ E)$, зависящую от двух аргументов, при конкретном виде потенциала дефекта. Мы рассмотрим сначала простейшую модель резкого изменения потенциала:

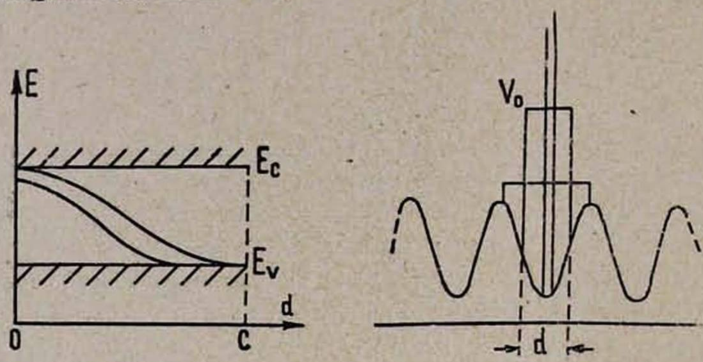
$$V(x) = V_0\, \theta(x - x_1)\, \theta(x_2 - x). \tag{8}$$

Тогда имеем

$$G_2(x,\ x;\ E) = i\left[2\sqrt{E - V_0}\right]^{-1},\ G_2' = 0,\ k = \sqrt{E - V_0},\ \varkappa = \sqrt{V_0 - E}.$$

Анализ уравнения (7) показывает, что положение уровня (или уровней) существенно зависит от выбора параметров V_0 и x_1($x_2 = a - x_1$, a — постоянная решетки). Интересен случай, когда высота и ширина потенциала меняются, но площадь остается неизменной ($V_0 d = \mathrm{const}$). При изменении d в пределах $0 < d < a$ (при $d \to 0$ осуществляется переход к δ-образному потенциалу) положение уровня в запрещенной зоне меняется довольно существенно (см. рисунок), что наглядно иллюстрирует чувствительную зависимость результатов от формы потенциала. Это обстоятельство представляет собой известное затруднение в теории глубоких уровней.

Есть случаи, заслуживающие подробного рассмотрения. Если контактные точки являются экстремальными точками периодического потенциала, что соответствует крайним случаям выбора вышеуказанного параметра d, имеет место равенство $G_1' \equiv 0$ (см. [5]). Функция Грина при совпадающих координатах тогда может иметь нестандартное поведение: на-



Схематическое изображение изменения положения уровней в запрещенной зоне в зависимости от $d(d=2x_0,\ V_0 d=\mathrm{const})$. Справа показан выбор модели потенциала дефекта в трех случаях.

пример, в случае максимума она обращается в нуль на нижнем крае запрещенной зоны (см. [5, 6]). Соответствующим выбором параметров можно добиться того, чтобы уровень находился вблизи верхнего края низколежащей разрешенной зоны, хотя он может отщепляться и от высоколежащей разрешенной зоны. Кроме этого радиус локального состояния может значительно превышать потоянную решетки, так что уровень воспринимается как мелкий. Для таких «мелких» уровней имеет место, как и в случае δ-образного потенциала дефекта [2], нестандартная зависимость радиуса локального состояния r_0 от энергии, отсчитанной от края близлежащей разрешенной зоны E_A, $r_0 \sim E_A^{-2}$.

В случае же, показанном на рисунке, при $d \to 0$ нижний уровень может стать «мелким» (верхний прижат к краю зоны), но, как легко убедиться, он отщеплен от низколежащей разрешенной зоны. При малых d мы фактически имеем два мелких уровня, однако один из них является нестандартным: он образован из состояний нижней разрешенной зоны, принадлежащих всей зоне Бриллюэна. Естественно, что поведение таких мелких уровней должно отличаться от стандартных. В частности, связанный с таким центром электрон может эффективно взаимодействовать как с длинноволновыми, так и с коротковолновыми колебаниями решетки.

3. Перейдем к случаю достаточно плавного потенциала дефекта, когда функцию Грина G_2 можно вычислить в квазиклассическом приближении ($x_1 = -x_0,\ x_2 = x_0$):

$$G_2(xx;\ E) = \frac{i}{2k},\quad k = \frac{1}{x_0}\int\limits_0^{x_0} \sqrt{E - V_2(x)}\, dx,$$

$$G_2' \approx 0, \quad \varkappa = \frac{1}{x_0}\int_0^{x_0} \sqrt{-E+V_2(x)}\, dx.$$

Тогда мы имеем возможность определить псевдопотенциалы в зависимости от конкретной формы истинного потенциала. Отметим, однако, что в отличие от стандартного квазиклассического подхода для определения уровней энергии здесь параметр x_0 не является классической точкой поворота. Более того, соответствующим выбором $V_2(x)$ можно добиться того, чтобы точка поворота вообще не входила в интересующий нас интервал $0<x<x_0$. Отметим также, что использованное условие квазиклассичности относится лишь к потенциалу дефекта, а на периодическое поле не накладывается ограничений.

Рассмотрим пример, когда имеет место разрыв потенциала в контактных точках, но внутри он меняется по параболическому закону:

$$V_2(x) = V_0 + bx^2, \quad -x_0 < x < x_0.$$

Тогда при $E > V_0 + bx^2$, $b > 0$ имеем

$$k = \frac{E-V_0}{2x_0\sqrt{b}}\left\{\arcsin\left[\sqrt{\frac{b}{E-V_0}}\,x_0\right] + \sqrt{\frac{b}{E-V_0}}\,x_0\sqrt{1-\frac{bx_0^2}{E-V_0}}\right\},$$

а остальные случаи получаются из этого выражения соответствующим аналитическим продолжением.

Если по-прежнему имеет место разрыв потенциала в контактных точках, но внутри он меняется так, что выполняется условие

$$V_2(x) = V_0 + \delta V, \quad |\delta V| \ll |E - V_0|,$$

то легко учесть первую поправку:

$$k \simeq \sqrt{E-V_0} - \frac{\langle \delta V \rangle}{2\sqrt{E-V_0}}, \quad \langle \delta V \rangle = \frac{1}{x_0}\int_0^{x_0} \delta V dx.$$

Иногда может оказаться удобным аппроксимировать потенциал дефекта ломанной кусочно-гладкой линией. В таких случаях функцию G_2 можно найти из формулы для функции Грина контактной или двухконтактной задачи [3]. Наряду с использованием различных приближенных методов для нахождения G_2 могут представить интерес такие случаи потенциала дефекта, когда G_2 удается вычислить точно. Для примера укажем потенциал осциллятора или электрического поля. Вычислительная сторона здесь весьма трудоемка и нет необходимости остановиться на этих случаях.

Таким образом, с методической точки зрения нахождение энергетических уровней дефектов в запрещенной зоне одномерной периодической системы не встречает принципиальных трудностей, коль скоро известна функция Грина для последней.

4. Для количественного определения положения дискретных уровней необходимо вычислить функцию Грина идеальной периодической системы. Мы рассмотрим случай полупроводников с узкой запрещенной зоной, когда

функцию Грина можно вычислить в двухзонном приближении $k \cdot p$-метода. Не останавливаясь на деталях расчета, приведем окончательный результат при совпадающих аргументах:

$$G_1(xx;\ E) = \frac{a}{2\pi} \frac{\Delta}{\sqrt{\Delta^2 - E^2}} \left\{ \frac{E}{\Delta} + \cos \frac{2\pi}{a} x \right\}, \tag{9}$$

где Δ—полуширина запрещенной зоны.

С помощью (9) уравнение (7) можно привести к виду

$$E = \Delta \cos \left(\frac{2\pi}{a} x_0 + \varphi_{\pm} \right), \tag{10}$$

$$\varphi_{\pm} = 2 \operatorname{arc\,tg} \left\{ \frac{a}{2\pi} \frac{G_2' - [\operatorname{th}(\varkappa x_0)]^{\pm 1}}{G_2} \right\} \quad \text{при} \quad 0 < \frac{2\pi}{a} x_0 + \varphi_{\pm} < \pi.$$

В общем случае выражение (10) представляет собой трансцендентное уравнение для определения уровней энергии. Тем не менее есть случаи, когда псевдопотенциалы дефекта слабо зависят от энергии. Тогда формула (10) дает явную зависимость энергетических уровней от параметров потенциала дефекта. Такая ситуация реализуется, например, в модели (8) при условии $V_0 \gg E$.

В заключение отметим, что развитый подход при определенных предположениях можно применить при исследовании контактных состояний в МДП-структурах. Аналогичный приближенный подход можно развить и в реальной трехмерной задаче о глубоких уровнях дефектов в полупроводниках в резко меняющихся полях. Эти вопросы заслуживают подробного рассмотрения и выходят за рамки настоящей работы.

Ереванский государственный
университет
ИРФЭ АН АрмССР

Поступила 13.IV.1978

ЛИТЕРАТУРА

1. *З. А. Касаманян.* ЖЭТФ, 61, 1215 (1971).
2. *Ж. Р. Паносян, В. А. Меликсетян, З. А. Касаманян.* ФТП, 10, 918 (1976).
3. *З. А. Касаманян, Э. С. Юзбашян.* Ученые записки ЕрГУ, № 2, 43 (1977).
4. *А. А. Варданян, З. А. Касаманян.* Изв. АН АрмССР, Физика, 12, 75 (1977).
5. *З. А. Касаманян.* Изв. АН АрмССР, Физика, 11, 436 (1976).
6. *З. А. Касаманян.* ЖЭТФ, 69, 281 (1975).

ԴԵՖԵԿՏՆԵՐԻ ԷՆԵՐԳԵՏԻԿ ՍՊԵԿՏՐԸ ՄԻԱՉԱՓ ՊԱՐԲԵՐԱԿԱՆ ՍԻՍՏԵՄՈՒՄ

Զ. Հ. ԿԱՍԱՄԱՆՅԱՆ, Ս. Մ. ՄՈՎՍԻՍՅԱՆ, Վ. Մ. ԳԱՍՊԱՐՅԱՆ

Զարգացված է էներգետիկ մակարդակների ճշգրիտ տեսություն միաչափ դեպքում։ Խնդրի ձևակերպումը տրվում է նաև փսևդոպոտենցիալի լեզվով։ Որոշակի մոդելների համար, երբ դեֆեկտի պոտենցիալը կրում է կտրուկ փոփոխություն, գտնված են համապատասխան փսևդոպոտենցիալները։ Քննարկվում է մակարդակի տեղի փոփոխման կախվածությունը պոտենցիալի կոնկրետ տեսքից։ Ցույց է տրված, որ որոշ դեպքերում առաջանում են ոչ սովորական ծանծաղ մակարդակներ։

ENERGY SPECTRUM OF DEFECTS IN ONE-DIMENSIONAL PERIODIC SYSTEM

Z. H. KASAMANYAN, S. M. MOVSISYAN, V. M. GASPARYAN

A rigorous theory of energy levels in one-dimensional case is developed. The formulation of the problem is also given in terms of pseudopotentials. For particular models of abrupt variation of the potential the corresponding pseudopotentials are obtained. The dependence of the level position on the definite form of the potential is discussed. Unusual shallow levels are shown to arise in some cases.