

ОСЦИЛЛЯЦИИ ЛОКАЛЬНОЙ ПЛОТНОСТИ СОСТОЯНИЙ
В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ И МДП СТРУКТУРАХ

А. А. ВАРДАНЯН, Э. А. КАСАМАНЯН

Исследуется поведение локальной плотности состояний гетероструктуры в зависимости от расстояния от границы раздела двух различных кристаллов, образующих гетероструктуру. Получена общая формула для локальной плотности состояний при произвольных условиях сшивания периодических потенциалов. В области разрешенной зоны она является осциллирующей функцией, а в области запрещенной зоны экспоненциально падает по мере удаления от границы раздела. Рассматриваются также случаи плавного гетероперехода и система металл—диэлектрик—полупроводник. Приведены результаты численного расчета локальной плотности состояний для модели гетероперехода $Ge-GaAs$.

В гетероструктурах, МДП системах и т. п. граница раздела двух разнородных сред может играть заметную роль в термодинамических, электрических, оптических и других свойствах системы. Все эти свойства в той или иной степени зависят от энергетического спектра в области вблизи перехода [1]. В частности, наличие энергетических уровней в общей запрещенной зоне контактирующих подсистем может сказаться на протекании генерационно-рекомбинационных процессов.

Для исследования энергетического спектра гетероструктуры в области вблизи перехода необходимо знать детальную структуру переходной области, поскольку от условий сшивания потенциалов двух разнородных кристаллов существенно зависит локальная плотность состояний. Например, положение контактного уровня в общей запрещенной зоне двух идеальных систем весьма чувствительно к точке сшивания периодических одномерных потенциалов [2—4]. Локальная плотность и число энергетических состояний в зависимости от расстояния от контактной точки по обе стороны границы раздела, вообще говоря, имеют осцилляционный характер. В случае конкретной модели гетероструктуры и простых граничных условий такой вывод получен в [2]. Однако вариация граничных условий может привести к заметному изменению как положения контактного уровня, так и локальной плотности состояний вблизи перехода. Поэтому представляет интерес исследование вопроса при произвольных граничных условиях. Этой цели легко можно достичь в методе функций Грина (ФГ), позволяющем также провести исследование в общем виде независимо от модели для потенциалов в двух областях гетероструктуры. Аналогичным образом можно исследовать локальную плотность состояний в системе металл—диэлектрик—полупроводник.

Пусть плоскость $x = x_1$ является границей раздела двух сред. Будем считать, что имеется хорошее соответствие постоянных решетки двух кристаллов, образующих гетероструктуру, а система в целом обладает дву-

мерной трансляционной инвариантностью в любой плоскости x . Последнее допущение весьма существенно для упрощения трехмерных расчетов. Если плоскость раздела является плоскостью симметрии отдельных кристаллов, то при малых значениях компоненты квазиволнового вектора вдоль плоской границы трехмерная теория эффективно сводится к квазиодномерной (см. [5, 6]). Мы ограничимся этим случаем, что позволит далее рассматривать задачу в одномерном виде. Переход от одномерной теории к трехмерной можно осуществить в дальнейшем просто заменой одномерной ФГ на поверхностную ФГ, зависящую от двумерного волнового вектора вдоль плоскости раздела в качестве параметра. Аналогичным образом интересующая нас одномерная плотность состояний в трехмерной теории также будет зависеть от этого параметра.

Задачу будем рассматривать в приближении плоских энергетических зон. Учет изгиба краев зон вблизи границы раздела, обусловленного наличием пространственного заряда, может привести к отклонению кристаллических потенциалов отдельных подсистем от периодического. Однако это дополнительное к периодическому поле протяженностью в несколько сот ангстрем является плавно меняющимся в пространстве, так что его можно учитывать в квазиклассическом приближении [7]. Тогда к энергии следует добавить потенциальную энергию в каждом узле, а в локальной плотности состояний возникнет дополнительная зависимость от номера узла. В итоге общий ход локальной плотности состояний видоизменится в соответствии с ходом дополнительного плавно меняющегося потенциала.

В случае резкого гетероперехода необходимо знать контактную ФГ двух взаимодействующих подсистем. Явное выражение для нее задается через ФГ невзаимодействующих не ограниченных с двух сторон отдельных подсистем, G_1 и G_2 [8]:

$$G_I(x, x) = G_1(x, x) - r_{12} \frac{G_1(x, x_1) G_1(x_1, x)}{G_1(x_1, x_1)}, \quad x < x_1, \quad (1)$$

$$G_{II}(x, x) = G_2(x, x) - r_{21} \frac{G_2(x, x_1) G_2(x_1, x)}{G_2(x_1, x_1)}, \quad x > x_1, \quad (2)$$

где комплексные коэффициенты r_{12} и r_{21} выражаются явно через ФГ G_1 и G_2 в контактной точке x_1 .

Мнимые части ФГ (1) и (2) «определяют» локальные плотности состояний в левой и правой частях от контактной точки x_1 [3]. Однако эти функции в зависимости от $r(x = na + r, n = 0; \pm 1; \dots; 0 \leq r \leq a, a$ — постоянная решетки) быстро осциллируют в пределах одной постоянной решетки. С другой стороны, функции

$$\rho_I(E) = \frac{1}{\pi L} \int_{-\infty}^{x_1} \text{Im } G_I(x, x, E) dx, \quad (3)$$

$$\rho_{II}(E) = \frac{1}{\pi L} \int_{x_1}^{\infty} \text{Im } G_{II}(x, x, E) dx$$

($2L$ — длина одномерной системы), представляющие собой средние плотности состояний на единичный интервал длины, не содержат информации о локальных свойствах неоднородной системы. Удобными характеристиками являются функции

$$\rho_I(n, E) = \frac{1}{\pi a} \int_{na+x_1}^{(n+1)a+x_1} \operatorname{Im} G_I(x, x, E) dx, \quad n = -1, -2, \dots, \quad (4a)$$

$$\rho_{II}(n, E) = \frac{1}{\pi a} \int_{na+x_1}^{(n+1)a+x_1} \operatorname{Im} G_{II}(x, x, E) dx, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (4b)$$

зависящие от номера узла решетки и энергии. Чтобы получить выражения (3) достаточно в (4) провести суммирование по соответствующим узлам n .

Вычисление локальной плотности состояний (4) можно провести в общем виде, если принять во внимание легко доказываемые точные формулы $\left(h = 2m_0 = 1, G' \equiv \frac{\partial}{\partial x} G(x, x), G \equiv G(x, x) \right)$

$$\int_{x_1}^{x_2} G(x, x) dx = \left[i \frac{d\theta}{dE} - \frac{1}{2} G \frac{\partial}{\partial E} \left(\frac{G'}{G} \right) \right] \Big|_{x_1}^{x_2}, \quad (5)$$

$$\int_{x_1}^{x_2} G(x, x) e^{2i\theta(x)} dx = -\frac{1}{2} e^{2i\theta} G \frac{\partial}{\partial E} \left(\frac{G' - 1}{G} \right) \Big|_{x_1}^{x_2},$$

где $\theta(x, E)$ — фазовая функция, связанная с ФГ [9],

$$\theta(x, E) = \int \frac{idx}{2G(x, x, E)}.$$

В случае идеальной периодической системы отсюда можно получить $(G(x_1, x_1) = G(x_1 + a, x_1 + a) \equiv G)$

$$\int_0^a G^2(x_1 + r, x_1) dx = \frac{G^2}{2} \left(1 - e^{2ika} \right) \frac{\partial}{\partial E} \left(\frac{G' - 1}{G} \right), \quad (6)$$

$$\theta(x_1 + an) - \theta(x_1) = ikan,$$

где k — квазиволновое число в направлении x .

В случае гетероструктуры, каждая подсистема которой является идеально периодической (резкий гетеропереход), имеем

$$\rho_I(n, E) = \rho_1(E) + \frac{1}{2\pi a} \operatorname{Im} \left\{ r_{12} \left[e^{2ik_1 a |n|} \left(1 - e^{2ik_1 a} \right) \right] G_1 \frac{\partial}{\partial E} \left(\frac{G'_1 + 1}{G_1} \right) \right\}, \quad (7a)$$

$$n = 0, -1, -2, \dots,$$

$$\rho_{II}(n, E) = \rho_2(E) - \frac{1}{2\pi a} \operatorname{Im} \left\{ r_{21} \left[e^{2ik_2 a n} \left(1 - e^{2ik_2 a} \right) \right] G_2 \frac{\partial}{\partial E} \left(\frac{G'_2 - 1}{G_2} \right) \right\}, \quad (7b)$$

$$n = 1, 2, \dots,$$

где

$$\rho_j(E) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \frac{dk_j}{dE}, \quad j=1, 2$$

есть плотности состояний для неограниченных отдельных периодических подсистем. При суммировании по всем n выражения в квадратных скобках обращаются в единицу, что дает

$$\rho_I(E) = \rho_{I1}(E) + \frac{1}{2\pi L} \operatorname{Im} \left[r_{12} G_1 \frac{\partial}{\partial E} \left(\frac{G'_1 + 1}{G_1} \right) \right], \quad (8a)$$

$$\rho_{II}(E) = \rho_2(E) - \frac{1}{2\pi L} \operatorname{Im} \left[r_{21} G_2 \frac{\partial}{\partial E} \left(\frac{G'_2 - 1}{G_2} \right) \right]. \quad (8b)$$

Формулы (7) и (8) справедливы как в разрешенной зоне j -подсистемы, когда квазиволновое число k_j является вещественным, так и в запрещенной зоне, когда k_j следует аналитически продолжить ($k_j = i\gamma_j$, $\gamma_j > 0$).

Имеются три характерные области энергии. Рассмотрим сначала область общей запрещенной зоны, когда обе величины γ_j и G_j вещественны. Плотности состояний (7) и (8) отличны от нуля лишь тогда, когда энергетический аргумент E совпадает с полюсом амплитуды отражения r_{12} или r_{21} , дающим энергетический уровень E_0 на границе раздела двух подсистем. Знаменатель указанной амплитуды дается выражением

$$D(E) = \frac{G'_1 + 1}{G_1} - \frac{G'_2 - 1}{G_2};$$

таким образом, $D(E_0) = 0$.

Локальные плотности состояний теперь имеют вид

$$\rho_I(n, E) = \frac{1}{2a} e^{-2\gamma_1 a} |n| (1 - e^{-2\gamma_1 a}) \frac{D'_1(E)}{D'_1(E) + D'_2(E)} \delta(E - E_0), \quad (9a)$$

$$\rho_{II}(n, E) = \frac{1}{2a} e^{-2\gamma_2 a} |n| (1 - e^{-2\gamma_2 a}) \frac{D'_2(E)}{D'_1(E) + D'_2(E)} \delta(E - E_0), \quad (9b)$$

где $D'_j(E)$ означает производную по энергии лишь от величин (квазиволнового числа, ФГ), характеризующих j -подсистему.

Естественно, величина

$$\rho_I(E) + \rho_{II}(E) = \frac{1}{2L} \delta(E - E_0)$$

является обычной плотностью состояний и имеет стандартный вид.

При сшивании периодических потенциалов в их экстремальных точках для всех значений энергии имеем $G'_j = 0$. Если рассмотреть теперь область энергий, разрешенную для обеих подсистем, то амплитуда отражения $r_{12} = -r_{21}$ оказывается вещественной. Тогда плотности состояний (8) не отличаются от невозмущенных:

$$\rho_I(E) = \rho_1(E) \text{ и } \rho_{II}(E) = \rho_2(E).$$

Тем не менее локальные плотности состояний

$$\rho_1(n, E) = \rho_1(E) - \frac{1}{\pi a} G_1 \frac{\partial}{\partial E} \left(\frac{1}{G_1} \right) r_{12} \sin k_1 a \cos k_1 a (2|n| + 1), \quad (10a)$$

$$\rho_{II}(n, E) = \rho_2(E) - \frac{1}{\pi a} G_2 \frac{\partial}{\partial E} \left(\frac{1}{G_2} \right) r_{21} \sin k_2 a \cos k_2 a (2n - 1) \quad (10b)$$

отличаются от невозмущенных и являются осциллирующими функциями энергии и номера узла n .

Если произвести сшивание периодических потенциалов в произвольной точке x , из-за предельного перехода $L \rightarrow \infty$ плотности состояний (8) практически не будут отличаться от невозмущенных. Локальные плотности состояний по-прежнему будут иметь осцилляционный вид, но выражения для них будут несколько более сложными.

Перейдем теперь к случаю, когда рассматриваемая энергия находится в разрешенной области одной (например, первой) подсистемы и в запрещенной области для другой. Здесь имеет место перераспределение разрешенных энергетических состояний из одной подсистемы в запрещенную область энергий другой подсистемы (k_1 вещественно, $\gamma_2 > 0$).

Для простоты снова будем считать, что в точке сшивания периодические потенциалы принимают свои экстремальные значения. Тогда для локальной плотности состояний имеем

$$\begin{aligned} \rho_I(n, E) &= \frac{1}{\pi a} [e^{-2\gamma_1 a |n|} (1 - e^{-2\gamma_1 a})] \frac{\partial}{\partial E} \left(\arctg \frac{G_1}{|G_2|} \right)_1, \\ \rho_{II}(n, E) &= \rho_2(E) + \frac{1}{\pi a} \left\{ 2 \frac{\partial}{\partial E} \left(\arctg \frac{G_1}{|G_2|} \right)_2 \cdot \sin k_2 a (2n + 1) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\partial}{\partial E} \ln \left[|G_2| + \frac{G_1^2}{|G_2|} \right]_2 \cdot \cos k_2 a (2n + 1) \right\} \sin k_2 a. \end{aligned} \quad (11)$$

Видно, что локальная плотность состояний экспоненциально падает по мере удаления от контактной точки в сторону первой подсистемы. В зависимости от координат ширина запрещенной зоны плавно изменяется от одного значения до другого. Суммирование по соответствующим узлам в (11) дает плотность состояний в левой и правой частях гетероструктуры:

$$\rho_{II}(E) = \rho_1(E) + \frac{1}{\pi L} \frac{\partial}{\partial E} \left(\arctg \frac{G_1}{|G_2|} \right)_1, \quad \rho_I(E) = \frac{1}{\pi L} \frac{\partial}{\partial E} \left(\arctg \frac{G_1}{|G_2|} \right)_2,$$

а общее изменение плотности состояний во всей системе есть

$$\Delta \rho(E) = \frac{1}{\pi L} \frac{\partial}{\partial E} \left(\arctg \frac{G_1}{|G_2|} \right).$$

В случае плавного гетероперехода, когда протяженностью переходной области между кристаллами нельзя пренебречь, удобно разделить гетероструктуру на три области. Две крайние области можно считать идеально периодическими подсистемами 1 и 3. Аналогичным образом можно пред-

ставить и МДП систему, так что постановка задачи в этих двух случаях является идентичной. Для вычисления локальной плотности состояний здесь необходимо задать ФГ трех взаимодействующих подсистем (двух-контактной задачи) [8]

$$\begin{aligned} G_I(x, x) &= G_1(x, x) \{1 - R_{12} e^{2i[\theta_1(x_1) - \theta_1(x)]}\}, \quad x \leq x_1, \\ G_{II}(x, x) &= \frac{G_2(x, x)}{1 - \lambda r_{21} r_{23}} \{1 + \lambda r_{21} r_{23} - r_{21} e^{2i[\theta_2(x) - \theta_2(x_1)]} - \\ &\quad - r_{23} e^{2i[\theta_2(x_1) - \theta_2(x)]}\}, \quad x_1 \leq x \leq x_2, \\ G_{III}(x, x) &= G_3(x, x) \{1 - R_{32} e^{2i[\theta_3(x) - \theta_3(x_2)]}\}, \quad x \geq x_2, \end{aligned} \quad (12)$$

где

$$\begin{aligned} \lambda &= \exp \left\{ \int_{x_1}^{x_2} \frac{idx}{G_2(x, x)} \right\} = \exp [2i[\theta_2(x_2) - \theta_2(x_1)]], \\ R_{32} &= \frac{r_{32} + \lambda r_{21} (1 - r_{32} - r_{23})}{1 - \lambda r_{12} r_{23}}, \\ R_{12} &= \frac{r_{12} + \lambda r_{23} (1 - r_{12} - r_{21})}{1 - \lambda r_{12} r_{23}}. \end{aligned}$$

В крайних областях 1 и 3 для локальных плотностей состояний получаются формулы вида (7) с заменой r_{12} на R_{12} , r_{21} на R_{21} и G_2 на G_3 . В средней области на основе формул (6) и (12) можно получить компактное выражение для плотности состояний:

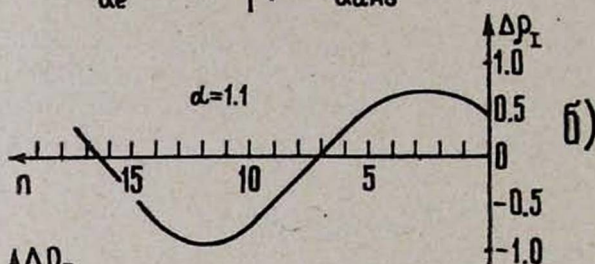
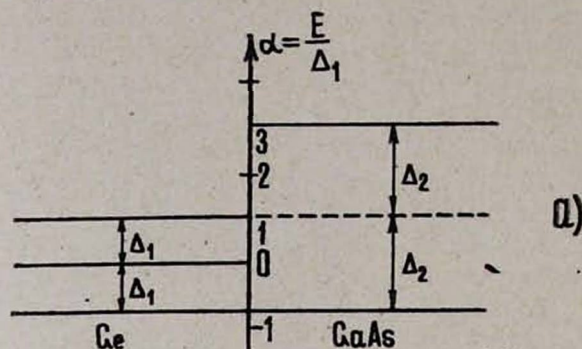
$$\begin{aligned} \rho_{II}(E) &= \frac{1}{\pi(x_2 - x_1)} \int_{x_1}^{x_2} \text{Im } G_{II}(x, x, E) dx = \\ &= - \frac{1}{\pi(x_2 - x_1)} \text{Im} \frac{1}{D} \left(\frac{\partial D}{\partial E} \right)_2, \end{aligned} \quad (13)$$

$$D(E) = \bar{G}_2(x_1, x_2) \left[\frac{G'_1 + 1}{G_1} - \frac{G'_2 - 1}{G_2} \right]_{x_1} \left[\frac{G'_2 + 1}{G_2} - \frac{G'_3 - 1}{G_3} \right]_{x_2} (1 - \lambda r_{12} r_{23}). \quad (14)$$

Рассмотрим случай, когда переходная область гетероструктуры или диэлектрический слой МДП системы имеют достаточно большую толщину, так что выполняется условие $\lambda \ll 1$. В этом приближении задача сводится к независимым задачам для двух переходов. Появление отличной от нуля плотности состояний в запрещенной зоне диэлектрика обусловлено перераспределением разрешенных энергетических состояний из полупроводника в запрещенную область энергий диэлектрика. Локальная плотность состояний в диэлектрическом слое распределена неоднородно. При условии $\kappa_2 a_2 \sim 1$ (a_2 — постоянная решетки диэлектрика, κ_2 — аналитически продолженное квазиволновое число диэлектрика в области запрещенной зоны) локальная плотность состояний практически отлична от ну-

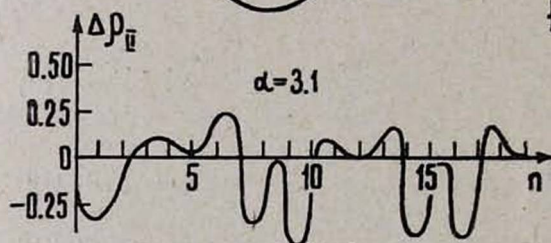
ля лишь на протяжении нескольких постоянных решетки. Поэтому плотность состояний (13) в диэлектрическом слое будет заметной, если его толщина достаточно мала. Например, в системе $M-SiO_2-Si$ состояния проникают в область оксидного слоя из металла и полупроводника на одну или две постоянные решетки. Одновременно локальные плотности состояний в полупроводнике и в металле уменьшаются, но имеют осцилляционный характер в зависимости от номера узла по обе стороны оксидного слоя.

Проиллюстрируем полученные результаты на примере модели резкого гетероперехода $Ge-GaAs$ с расположением границ энергетических зон,

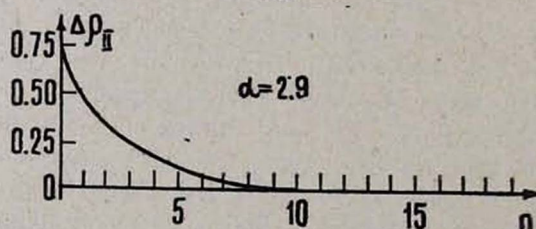


б)

Диаграмма энергетических зон гетероперехода $Ge-GaAs$ (а); изменение величины локальной плотности состояний в зависимости от номера узла для некоторых характерных значений энергии (б, в, г).



в)



г)

представленным на рисунке (а). Результаты численных расчетов величин $\Delta\rho_I = \pi/a [\rho_I - \rho_1]$ и $\Delta\rho_{II} = \pi/a [\rho_{II} - \rho_2]$ на основе выражений (7а) и (7б)

в зависимости от номера узла n для некоторых характерных значений энергии приведены на рисунке (б, в, г). Для ФГ идеальных периодических систем было использовано выражение в двузонном приближении кр-метода (см., например, [10]):

$$G_j(x, x, E) = \frac{\alpha}{4\pi\sqrt{\Delta_j^2 - E^2}} \left[E + \Delta_j \cos \frac{4\pi}{a} x \right], \quad j = 1, 2, \quad (15)$$

где Δ_j — полуширина запрещенной зоны (начало отсчета энергии E выбрано в ее середине). При численных расчетах были взяты следующие значения для параметров: $x_1 = 0$, $a = 5,66 \cdot 10^{-8}$ см, $2\Delta_2 = 1,6$ эВ, $2\Delta_1 = 0,7$ эВ.

Как видно из рисунка (б и в), локальная плотность состояний в разрешенных зонах имеет осцилляционный характер, при этом период осцилляций зависит от энергии:

$$\Delta n_j = \frac{\pi}{k_j a}, \quad k_j \approx \left[\frac{2m_j^*}{\hbar^2} \frac{E^2 - \Delta_j^2}{2\Delta_j} \right]^{1/2}, \quad j = 1, 2,$$

где m_1^* и m_2^* — эффективные массы электронов соответственно в левой и правой подсистемах.

По мере удаления от краев зон в глубь разрешенных зон периоды и амплитуды осцилляций в обеих подсистемах уменьшаются. В области запрещенной зоны правой подсистемы (см. рисунок (г)) по мере удаления от границы раздела x_1 имеет место экспоненциальный спад плотности состояний.

В заключение авторы выражают благодарность В. Л. Бонч-Бруевичу за обсуждение работы и ценные замечания, а также С. А. Касаманяну за помощь при выполнении численных расчетов.

Ереванский государственный
университет

Поступила 17.IV.1980

ЛИТЕРАТУРА

1. А. Милнс, Д. Фойхт. Гетеропереходы и переходы металл-полупроводник. Изд. Мир, М., 1975.
2. А. Т. Дарбасян, Э. А. Касаманян. Изв. АН АрмССР, Физика, 12, 75 (1977).
3. С. Tejedor, F. Flores. J. Phys., C11, L — 19 (1978).
4. B. D. Kandilarov et al. Phys. Stat. Sol., B86, 425 (1978).
5. Э. А. Касаманян, Э. С. Юзбашян. Ученые записки ЕГУ, № 1, 52 (1979).
6. В. Е. Степанов, В. А. Чалдышев. ФТТ, 12, 1671 (1970).
7. F. G. Allen, G. W. Gobeli. Phys. Rev., 127, 150 (1962).
8. Э. А. Касаманян, Э. С. Юзбашян. Ученые записки ЕГУ, № 3, 43 (1977).
9. Э. А. Касаманян. Изв. ВУЗ, Физика, № 11, 20 (1979).
10. А. А. Варданян, В. М. Гаспарян, Э. А. Касаманян. Изв. ВУЗ, Физика, № 6, 123 (1979).

ՎԻՃԱԿԱԿԱՆՈՒԹՅԱՆ ԵՏՈՒԹՅԱՆ ՕՍՑԻԼԼԱՑԻՆՈՒԹՅԱՆ
ՀԵՏԵՐՈԳԵՆՈՒԹՅԱՆ ՖԵՆՈՄԵՆՆԵՐՈՒՄ ԵՎ ՄԵՏԱԴ-ԴԻԷԼԵԿՏՐՈՆԻԿ
— ԿԻՍՆԱԶԱՂՈՐԴԻԶ ԿԱՌՈՒՑՎԱԾՔՆԵՐՈՒՄ

Ա. Հ. ՎԱՐԴԱՆՅԱՆ, Զ. Հ. ԿԱՍԱՄԱՆՅԱՆ

Հետազոտված է հետերոանցման լուկալ վիճակների խտության վարքը, կախված երկու տարբեր բյուրեղների բաժանման սահմանից ունեցած հեռավորությունից: Առաջված է ընդ-

Հանուր բանաձև լուրջ վիճակների խտության համար պարբերական պոտենցիալների կարման կամայական պայմանների դեպքում: Թույլատրելի գոտու տիրույթում այն ունի օսցիլյացիոն բնույթ, իսկ արգելված գոտու տիրույթում այն էքսպոնենցիալ օրենքով նվազում է բաժանման սահմանից հեռանալուն զուգընթաց: Քննարկված են նաև սահուն հետերոանցման և մետաղ-դիէլեկտրիկ-կիսահաղորդիչ կառուցվածքի դեպքերը: Բերված են Ge-GaAs հետերոանցման մոդելի համար լուրջ վիճակների խտության թվային հաշվումների արդյունքները:

OSCILLATIONS OF LOCAL DENSITY OF STATES IN HETEROJUNCTIONS AND MIS STRUCTURES

A. H. VARDANYAN, Z. H. KASAMANYAN

The behaviour of the local density of states in a heterojunction has been investigated depending on the distance from the interface between two crystals forming the heterojunction. A general formula for the local density of states at arbitrary conditions of periodic potentials matching is obtained. In the allowed band it shows oscillation behaviour, while in the gap it exponentially falls with the increase of the distance from the boundary. The cases of smooth heterojunction and the metal-insulator-semiconductor system are also considered. The results of numerical calculations of the local density of states for the Ge-GaAs model heterojunction are presented.