

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

ПОПЕРЕЧНАЯ ЭФФЕКТИВНАЯ МАССА ПОВЕРХНОСТНОЙ ПОДЗОНЫ В ПОЛУПРОВОДНИКАХ С УЗКОЙ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНОЙ

Э. А. КАСАМАНЯН, В. М. ГАСПАРЯН

В последнее время выяснилось, что вариация граничных условий, накладываемых на поверхности полупроводников, существенно сказывается на числе и положении поверхностных состояний (ПС) в запрещенной зоне [1—4]. Такая чувствительная зависимость результатов от граничных условий требует учета реальных условий на границе раздела. В частности, необходимо учитывать наклонное падение потенциала поверхности [3]. Уравнение, определяющее спектр ПС в трехмерной постановке задачи при малых значениях двумерного волнового вектора q вдоль поверхности, в достаточно хорошем приближении имеет вид [5]

$$\frac{G'_1(z_0, z_0; E, q) + 2m_0\hbar^{-2}}{G_1(z_0, z_0; E, q)} = \frac{G'_2(z_0, z_0; E, q) - 2m_0\hbar^{-2}}{G_2(z_0, z_0; E, q)}, \quad (1)$$

где G_1 и G_2 — квазиодномерные или поверхностные функции Грина (ФГ) электрона в левой (поверхность) и правой (кристалл) подсистемах, z_0 является плоскостью раздела между двумя подсистемами, m_0 — истинная масса электрона.

Исследование энергетического спектра контактной задачи на основе уравнения (1) здесь целиком сводится к нахождению явного вида ФГ неограниченной системы. В частности, ФГ электрона в идеальном периодическом поле, вычисленная в двухзонном приближении кр-метода, имеет вид (начало отсчета энергии совпадает с серединой запрещенной зоны):

$$G(z, z; E, q) = \frac{m_0}{g\hbar^2} \frac{1}{\sqrt{1-\omega^2 + \alpha q^2}} [\omega + \cos 2gz], \quad (2)$$

где $\omega = E/\Delta$, Δ — полуширина запрещенной зоны, $g = \pi/a$, a — постоянная решетки, $\alpha = \hbar^2/\Delta m$, m — эффективная масса электрона, равная эффективной массе дырки.

ФГ (2) вычислена в первом исчезающем приближении по малому параметру $m/m_0 \ll 1$. Такое приближение иногда может стать недостаточным, например, когда ФГ (2) в запрещенной зоне обращается в нуль. Кроме того, ФГ (2) не удовлетворяет точному соотношению между квазиволновым числом k и ФГ в идеальном периодическом поле [6]:

$$ka = m_0\hbar^{-2} \int_0^a \frac{idz}{G(z, z; E)}. \quad (3)$$

В настоящей заметке мы вычисляем $\Phi\Gamma$ в трехзонном приближении, справедливом, например, в кристаллах *In Sb*, и на ее основе исследуем поведение эффективной массы двумерной поверхностной подзоны в запрещенной зоне.

Для вычисления явного вида $\Phi\Gamma$ вместо стандартного подхода с помощью билинейного разложения по собственным функциям мы здесь применим более простой способ. $\Phi\Gamma$ электрона в периодическом поле, наряду с (3), удовлетворяет точным соотношениям:

$$i \frac{dk}{dE} = \frac{1}{a} \int_0^a G(z, z; E) dz, \quad (4)$$

$$G'(z, z; E) = \pm 2 m_0 \hbar^{-2} \quad \text{при } G(z, z; E) = 0. \quad (5)$$

Поскольку $G(z, z; E)$ является периодической функцией с периодом a , ее можно представить в виде

$$G(z, z; E, q) = \sum_{n=0}^{\infty} \alpha_n(E, q) \cos 2gnz. \quad (6)$$

В полупроводниках с узкой запрещенной зоной обычно можно ограничиться двумя членами разложения, а остальные члены, содержащие энергетические знаменатели до следующих зон, малы. Учет этих малых членов может привести лишь к незначительной перенормировке эффективных масс. Это обстоятельство при вычислении плотности состояний не играет роли, но член первого приближения по малому параметру m/m_0 все же необходимо оставить для обеспечения выполнения точного свойства (3) в периодическом поле. Такое уточнение вида $\Phi\Gamma$ может оказаться необходимым при ее использовании в других задачах, например, в задачах кинетики для восстановления явного вида $\Phi\Gamma$ $G(z, z')$ при $z \neq z'$, если известна $\Phi\Gamma$ $G(z, z)$ [6].

Учитывая сказанное, в разложении (6) в общем случае можно оставить три члена. Если интересоваться запрещенной зоной узкощелевого полупроводника, находящейся между первыми разрешенными зонами, то имеем

$$G(z, z; E, q) = \alpha_0(E, q) + \alpha_1(E, q) \cos 2gz + \alpha_2(E, q) \cos 4gz. \quad (7)$$

Фигурирующие в (7) три функции уже можно найти из точных свойств (3)—(5) $\Phi\Gamma$.

Используя явный вид плотности состояний в разрешенных зонах в трехзонной модели Кейна (зона проводимости, зоны легких и тяжелых дырок), при переходе в запрещенную зону с помощью аналитического продолжения имеем (m_p — эффективная масса тяжелых дырок):

$$\rho(E, q) = \frac{m_0}{gh^2} \left[\frac{\omega}{\sqrt{1 - \omega^2 + \alpha q^2}} - \frac{\gamma}{\sqrt{1 + \omega + \beta q^2}} \right],$$

где

$$\gamma = [2^{-1} m^{-1} m_p]^{1/2}, \quad \beta = 2^{-1} m_p^{-1} g^{-2} m_0^2.$$

Тогда для ФГ получаем следующий вид:

$$G(z, z; E, q) = \rho(E, q) + [m_0^2 g^{-2} \hbar^{-4} + \rho^2(E, q)]^{1/2} \times \\ \times \left(\cos 2gz + \frac{m}{m_0} \frac{|\rho|}{\rho} \cos 4gz \right). \quad (8)$$

Двухзонное приближение получается из (8) подстановкой $m_p = 0$:

$$G(z, z; E, q) = \frac{m_0}{g \hbar^2 \sqrt{1 - \omega^2 + \alpha q^2}} \left[\omega + \sqrt{1 - \omega^2 + \alpha q^2} \cos 2gz + \frac{m}{m_0} \frac{|\rho|}{\rho} \cos 4gz \right].$$

Эта ФГ, в отличие от (2), уже удовлетворяет точному соотношению (3).

Используя явный вид ФГ (8), при $m/m_0 \ll 1$ можно найти положение поверхностной подзоны и соответствующую поперечную эффективную массу. В предположении о разделении переменных вне кристалла, но при произвольной форме и длине падения потенциала поверхности, для эффективной массы поверхностной подзоны получаем выражения:

в двухзонном приближении ($m_p = 0$)

$$\frac{1}{m_s} = \hbar^{-2} \frac{\partial E}{q \partial q} \Big|_{q \rightarrow 0} = \frac{1}{m} \frac{\omega + \frac{m}{m_0} \sqrt{1 - \omega^2} \varphi'_0}{1 + \sqrt{1 - \omega^2} \varphi'_0}; \quad (9)$$

в трехзонном приближении ($m_p \gg m$)

$$\frac{1}{m_s} = \frac{1}{m} \frac{\omega - \sqrt{\frac{m}{8m_p} (1 - \omega)^{3/2} + \frac{m}{m_0} \left[1 + \left(\frac{\hbar^2 g}{m_0} \rho \right)^2 \right] \varphi'_0}}{1 + \sqrt{\frac{m_p}{8m} (1 - \omega)^{3/2} + \left[1 + \left(\frac{\hbar^2 g}{m_0} \rho \right)^2 \right] \varphi'_0}}, \quad (10)$$

где

$$\varphi_0 = 2 \arctg G_1 [G_1 + 2 m_0 \hbar^{-2}]^{-1}, \quad \varphi'_0 = \frac{\partial \varphi_0}{\partial \omega}.$$

Реалистический потенциал поверхности меняется на значительную величину на расстояниях от одного до нескольких постоянных решеток, достигая постоянного значения вакуума V_0 . Хотя положение поверхностной подзоны чувствительным образом зависит от длины и формы падения этого потенциала, тем не менее поперечная эффективная масса в поверхностной подзоне слабо зависит от величины φ_0 , характеризующей потенциал поверхности, поскольку

$$\varphi'_0 = \Delta \frac{\partial \varphi_0}{\partial E} \sim \frac{\Delta}{V_0} \ll 1.$$

Физически это следует из того, что ПС проникает на значительную глубину в область узкощелевого полупроводника, а в области поверхности радиус локализации мал и имеет порядок длины падения потенциала поверхности. По этой причине носители, находящиеся в поверхностной подзоне, будут обладать поперечной эффективной массой, определяемой в основном полупроводником.

Поэтому формула для эффективной массы, например, (9) мало отличается от соответствующего выражения, полученного в модели бесконечно высокой потенциальной стенки [7]:

$$m_s = m \omega^{-1},$$

но асимптота $m_s \rightarrow \infty$ сдвигается от середины запрещенной зоны в сторону валентной зоны на малую величину

$$\omega_0 \simeq - \frac{m}{m_0} \varphi'_0.$$

Ереванский государственный
университет

Поступила 20. IV. 1981

ЛИТЕРАТУРА

1. B. Velický, I. Bartos. J. Phys., C 4, 104 (1971).
2. F. Flores, E. Louis, J. Rubio. J. Phys., C 5, 3469 (1972).
3. А. А. Вардамян, Э. А. Касаманян. Изв. АН АрмССР, Физика, 12, 129 (1977).
4. Э. А. Касаманян. Изв. АН АрмССР, Физика, 11, 436 (1976).
5. Э. А. Касаманян, Э. С. Юзбашян. Ученые записки ЕГУ, № 1, 52 (1979).
6. Э. А. Касаманян. Изв. ВУЗ, Физика, № 11, 20 (1979).
7. А. А. Вардамян, В. М. Гаспарян, Э. А. Касаманян. Изв. ВУЗ, Физика, № 6, 123 (1979).

ՄԱԿԵՐԵՎՈՒՅԹԱՅԻՆ ԵՆԹԱԳՈՏՈՒ ԼԱՅՆԱԿԱՆ ԷՖԵԿՏԻՎ ՄԱՍՍԱՆ ՆԵՂ ԱՐԳԵԼՎԱԾ ԳՈՏԻ ՈՒՆԵՑՈՂ ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴԻԶՆԵՐՈՒՄ

Ջ. Հ. ԿԱՍԱՄԱՆԻԱՆ, Վ. Մ. ԳԱՍՊԱՐԻԱՆ

Նեղ արգելված գոտի ունեցող կիսահաղորդիչներում էլեկտրոնի Գրինի ֆունկցիայի հաշվման համար առաջարկված է պարզ եղանակ՝ Երկգոտու և եռգոտու մոտավորությամբ հաշվված է մակերևութային ենթագոտու լայնական էֆեկտիվ մասսան, կախված արգելված գոտում ենթագոտու ունեցած դիրքից, երբ հաշվի է առնվում մակերևութային պոտենցիալի թեք անկումը:

TRANSVERSE EFFECTIVE MASS OF SURFACE SUBBAND IN NARROW GAP SEMICONDUCTORS

Z. H. KASAMANIAN, V. M. GASPARIAN

A simple way for calculating the Green function of an electron in narrow gap semiconductors is proposed. The transverse effective mass of the subband depending on the position of the latter in the forbidden gap is calculated in two and three band approximation taking into account the smooth decrease in the surface potential.