Изв. АН Армянской ССР, Физика, т. 23, вып. 6, 323—328 (1988)

УДК 537.311.322

ПЛОТНОСТЬ СОБСТВЕННЫХ ПОВЕРХНОСТНЫХ СОСТОЯНИЙ В СЛУЧАЙНОМ ПОЛЕ ПОВЕРХНОСТИ ПОЛУПРОВОДНИКА

З. А. КАСАМАНЯН, М. А. ЧАЛАБЯН

Ереванский политехнический институт им. К. Маркса

(Поступила в редакцию 3 марта 1988 г.)

В двузонной модели полупроводника получено распределение для усредненной плотности поверхностных состояний по всей запрещенной зоне полупроводника. В модели случайно расположенной потенциальной стенки для поверхности оно имеет характерные максимумы вблизи краев запрещенной зоны. В модели относительно плавного изменения потенциала поверхности это распределение деформируется, и внутри запрещенной зоны могут возникнуть максимумы усредненной плотности собственных поверхностных состояний.

Реальные поверхности полупроводников имеют значительные отклонения от идеальной двумерной структуры. На поверхности полупроводников обычно имеется большое количество примесей и дефектов, поэтому при интерпретации экспериментальных данных принимаются во внимание, как правило, несобственные поверхностные состояния. Между тем, полное число собственных поверхностных состояний (СПС) должно иметь порядок $10^{14} \div 10^{15}$ см$^{-2}$, что и наблюдается экспериментально на атомарно чистой поверхности некоторых полупроводников в условиях сверхвысокого вакуума. Возникает естественный вопрос: что происходит с СПС в условиях реальной поверхности?

Здесь мы будем интересоваться случаем, когда симметрия реальной поверхности не меняется по сравнению с симметрией атомарно чистой поверхности в условиях сверхвысокого вакуума, т. е. отсутствуют релаксация и реконструкция поверхности, но имеется случайное поле вблизи поверхности, средние характеристики которого не являются малыми.

В настоящее время выяснено, что положение СПС существенно зависит от точки обрыва периодического поля потенциальной стенкой поверхности в пределах постоянной решетки или от формы и длины спадения несколько плавного потенциала поверхности (см. [1, 2]). Это указывает на то, что учет случайного поля для поверхности должен существенно сказаться в распределении СПС.

1. Модель граничных условий. Для определения формы этого распределения мы воспользуемся простой моделью случайно расположенной точки сшивания одномерного периодического поля решетки с поверхностным потенциалом, вообще говоря, несколько плавным и спадающим от вакуумного значения до потенциала решетки на расстоянии нескольких постоянных решетки. Задача о поверхности, разумеется, трехмерная, но при малых значениях двумерного волнового вектора вдоль поверхности q трехмерную задачу удается свести к квазиодномерной. Таким путем получаем уравнение, определяющее положение поверхностного состояния при данном q ($\hbar = 1$), в виде [3]:

$$\frac{G_1' + 2m_0}{G_1} = \frac{G_2' - 2m_0}{G_2}, \tag{1}$$

где $G_1 = G_1(z_0, z_0; q; E)$ — двумерный Фурье-образ функции Грина (ФГ) электрона в поле потенциала поверхности при совпадающих одномерных координатах: $z = z' = z_0$, $G_2(z_0, z_0; q; E)$ — та же функция в поле решетки, $z = z_0$ — плоскость раздела кристалла поверхностью, штрих означает производную по z_0, E — энергия, m_0 — масса свободного электрона.

Запись уравнения (1) с помощью ФГ весьма удобна для проведения качественных исследований, поскольку ФГ электрона G_2 в периодическом поле имеет ряд простых и точных свойств. Именно эти свойства ФГ позволяют выяснить качественную ситуацию без привлечения моделей, а также получить приближенную формулу для G_2 с целью проведения количественных исследований.

В двузонном полупроводнике выражение для ФГ электрона имеет вид [4]:

$$G_2(z, z; q; E) = \rho(q, E) + [\rho^2(q, E) + (m_0/p)^2]^{1/2} \cos 2pz, \tag{2}$$

где $p = \pi/a$, a—постоянная решетки в направлении z, перпендикулярном поверхности, $\rho(q, E)$—аналитически продолженная функция одномерной плотности состояний (зависящей от q в качестве параметра) в область запрещенной зоны полупроводника:

$$\rho(q, E) = \frac{d\varkappa_z}{qE}, \quad \varkappa_z = ik_z(q, E),$$

k_z— определяется из закона дисперсии $E = E(q, k_z)$.

Подстановка ФГ (2) в уравнение (1) дает

$$\operatorname{tg}(pz_0 + \varphi) = -\frac{1}{2p}\frac{G_1' + 2m_0}{G_1}, \tag{3}$$

где

$$\operatorname{tg} 2\varphi = m_0/p\rho.$$

Одномерная плотность поверхностных состояний, зависящая от q в качестве параметра, имеет δ—образный вид

$$\rho(q, E) = \delta[E - E(q, z_0)]$$

и существенно зависит от нефизического параметра z_0.

2. *Усредненная плотность состояний.* Будем теперь считать z_0 случайной величиной и, не ограничивая общности, принимающей любые значения в пределах постоянной решетки ($0 \leqslant z_0 \leqslant a$) с некоторой плотностью распределения $f(z_0)$. Тогда усредненная по этим реализациям одномерная плотность состояний имеет вид:

$$\langle\rho(q, E)\rangle = \frac{1}{a}\int_0^a f(z_0)\,\delta[E - E(q, z_0)]\,dz_0 = \frac{1}{a} f(z_0)\frac{dz_0}{dE}. \tag{4}$$

Правая часть уравнения (3), откуда мы должны определить зависимость $z_0 = z_0(q, E)$, вообще говоря, слабо зависит от z_0. Далее плотность вероятности будем считать постоянной ($f(z_0)=1$), что равносильно предположению о равновероятном распределении плоскости сшивания в пределах постоянной решетки. Тогда из (3) и (4) имеем:

$$<\rho(q, E)> = \frac{1}{ap}\frac{\partial}{\partial E}\left[\operatorname{arctg}(p\rho/m_0) - \operatorname{arctg}\frac{G_1' + 2m_0}{2pG_1}\right]. \qquad (5)$$

В простом случае модели достаточно высокой потенциальной стенки для поверхности, когда правая часть уравнения (3) не зависит также и от энергии $G_1' \to 0$ и $G_1 \to 0$. В полупроводниках с узкой запрещенной зоной закон дисспресии для электронов имеет вид

$$E = \pm [\Delta^2 + \Delta(q^2 + k_z^2)/m]^{1/2},$$

где m—эффективная масса электрона, равная эффективной массе легких дырок ($m_e = m_p = m$), Δ — полуширина запрещенной зоны, а начало отсчета энергии выбрано в ее середине. При вышеприведенных предположениях получаем:

$$k_z = [m(E^2 - \Delta^2)/\Delta - q^2]^{1/2}, \quad <\rho(q, E)> = \pi^{-1}[\Delta^2 - E^2 + q^2\Delta/m]^{-1/2}. \qquad (6)$$

Таким образом, вместо δ—образного вида при фиксированном значении z_0, усредненная одномерная плотность состояний имеет распределение (см. рис. 1а) по всей запрещенной зоне. В выбранной нами модели получается существенное перераспределение плотности поверхностных состояний с максимумами вблизи краев запрещенной зоны. В то же время общее число поверхностных состояний в рассмотренной запрещенной зоне, как легко убедиться интегрированием правой части (5), не меняется.

Хотя мы, в основном, интересуемся одномерной плотностью состояний, тем не менее трехмерную плотность состояний, зависящую лишь от энергии, легко получить, например из (6) интегрированием по двумерному волновому вектору q.

Если допустить, что эффективные массы электронов m_e и дырок m_p отличаются, то общий ход одномерной плотности состояний качественно не меняется. Возникает асимметрия распределения относительно середины запрещенной зоны. В этом случае закон дисспрессии в зонах можно представить в виде:

$$E = (q^2 + k_z^2)/2m' \pm [\Delta^2 + \Delta(q^2 + k_z^2)/m]^{1/2},$$

где через m и m' выражаются эффективные массы электронов и дырок

$$m'^{-1} + m^{-1} = m_e^{-1}, \quad -m'^{-1} + m^{-1} = m_p^{-1}.$$

Найдя $k_z = k_z(q, E) = i\varkappa_z(q, E)$, для функции плотности состояний получим формулу

$$\rho(q, E) = \frac{d\varkappa_z}{dE} = \frac{-(2m_e m_p)}{\left[q^2 + \dfrac{4m_e m_p(\Delta^2 - E^2)}{2m_p(\Delta + E) + 2m_e(\Delta - E)}\right]^{1/2}} \times$$

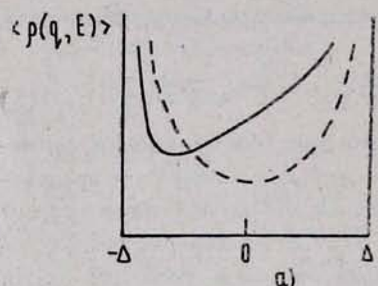
$$\times \frac{2m_p(\Delta + E)^2 - 2m_e(\Delta - E)^2}{[2m_p(\Delta + E) + 2m_e(\Delta - E)]^2}, \qquad (7)$$

позволяющую найти с помощью (5) усредненную плотность СПС. Из сопоставлений этих результатов видно, что при $q=0$, $\langle\rho\rangle_{m_e=m_p}$ достигает своего минимального значения при $E=0$, а $\langle\rho\rangle_{m_e\neq m_p}$ при $E=-\Delta(\sqrt{m_p}-\sqrt{m_e})/(\sqrt{m_p}+\sqrt{m_e})$. При этом отношение этих величин равно

$$\frac{\langle\rho\rangle_{m_e=m_p}}{\langle\rho\rangle_{m_e\neq m_p}}=\frac{2m^{1/2}}{m_p^{1/2}+m_e^{1/2}}<1,$$

т. е. минимальное значение $\langle\rho\rangle$ во втором случае больше по сравнению с первым (см. рис. 1а).

3. Обобщение модели. Полученное поведение усредненной плотности собственных поверхностных состояний является несколько общим и справедливым при выборе широкого круга моделей для потенциала поверхности. При использовании модели плавного изменения потенциала поверхности с вариацией его длины падения или формы в малых пределах (так,



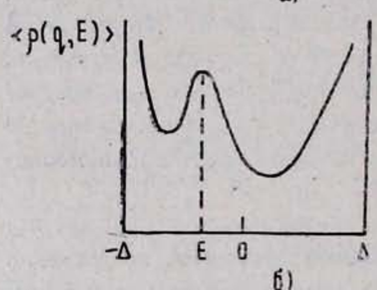


Рис. 1а. Качественная картина усредненной одномерной плотности состояний в запрещенной зоне. Пунктирная кривая соответствует случаю $m_e=m_p$, сплошная—$m_e\neq m_p$.

Рис. 1б. Усредненная плотность состояний в запрещенной зоне в случае $m_e=m_p$, когда уравнение (3) имеет два решения.

что уравнение (1) имеет единственное решение) распределение состояний практически не отличается от случая случайно расположенной потенциальной стенки. Действительно, в глубине запрещенной зоны положение уровня весьма чувствительно зависит от конкретной формы и длины падения потенциала поверхности, а при равновероятном усреднении плотность состояний становится малой. Вблизи краев запрещенной зоны радиус локализации состояний значительно превышает характерную длину падения потенциала поверхности, поэтому как его конкретная форма, так и длина падения здесь не играют заметной роли.

Положение резко меняется ,если форма и длина падения потенциала поверхности варьируются в более широких пределах, когда уравнение (1) имеет более одного решения. А это возможно только в том случае, когда ФГ электрона G_1 в поле потенциала поверхности имеет полюсы. Из уравнения (3) можно заключить, что число решений уравнения (3) (т. е. число поверхностных состояний в данной запрещенной зоне при фиксированном q) на единицу может превысить число полюсов ФГ G_1. Чтобы явно вычислить усредненную плотность состояний допустим, что ФГ G_1 в энергетическом интервале $-\Delta < E < \Delta$ имеет единственный полюс E_1 и $G_1' = 0$. При энергиях, близких к E_1, ФГ можно представить в виде билинейного разложения по собственным функциям:

$$G_1(z_0, z_0; q; E) = -|\psi_1(z_0, q)|^2/(E - E_1).$$

Тогда легко получить (при $q=0$)

$$\langle\rho(q, E)\rangle = \pi^{-1}(\Delta^2 - E^2)^{-1/2} + \pi^{-1}\Gamma[(E-E_1)^2 + \Gamma^2]^{-1/2}, \qquad (8)$$

где

$$\Gamma = p|\psi|^2/m_0 > 0.$$

Схематически, вид зависимости $\langle\rho(q, E)\rangle$ от энергии показан на рис. 1б, где из-за малости $\Gamma(\Gamma \ll |E_1|)$ имеется хорошо выраженный максимум при $E = E_1$. Нетрудно видеть, что если ФГ имеет несколько полюсов при $-\Delta < E < \Delta$, то могут возникнуть максимумы, число которых равно числу полюсов ФГ G_1.

Мы здесь обсудили качественную картину влияния случайного поля на собственные поверхностные состояния. Распределение плотности состояний в запрещенной зоне качественно согласуется с экспериментальными результатами, когда поверхность полупроводника примыкает к различным средам, имеющим неупорядоченное строение. Иногда наблюдается тонкая структура [5] или максимумы в средней части запрещенной зоны [6]. Эти особенности могут возникнуть как из-за собственных, так и несобственных поверхностных состояний, имеющих конечную ширину. Что касается определения положения соответствующих максимумов плотности состояний в конкретных случаях, то следует иметь в виду следующее. Количественная теория здесь встречается с большими трудностями, так как нам неизвестно конкретное микроскопическое строение реальной поверхности. Более того, если даже будут известны конкретные потенциалы, все равно для развития количественной теории возникают трудности, аналогичные трудностям в теории глубоких уровней объема. Причина здесь одна и та же: имеется относительно резкое пространственное изменение потенциалов на расстояниях порядка постоянной решетки.

По этой причине информацию о наличии и последующее определение положений максимумов плотности поверхностных состояний возможно получить только с помощью соответствующих экспериментальных исследований. Именно таким путем в работе [7] удалось предсказать возникновение поверхностных экситонов, связанных с поверхностными подзонами.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Девисон С., Левин Дж.* Поверхностные «таммовские» состояния. Изд. Мир, М., 1971, 280 с.
2. *Варданян А. А., Касаманян З. А.* Изв. АН АрмССР, Физика, 18, 129 (1977).
3. *Касаманян З. А., Юзбашян Э. С.* Уч. записки ЕГУ, № 1, 52 (1979).

4. *Гаспарян В. М., Касаманян З. А.* Изв. АН АрмССР, Физика, 16, 402 (1981).
5. *Flietner H., Füssel W., Sinh N. D.* Phys. Stat. Sol., 43, K99 (1977).
6. *Krentz E. W.* Phys. Stat. Sol., (a), 56, 687 (1979).
7. *Паносян Ж. Р., Касаманян З. А., Маилян А. Р.* Письма в ЖЭТФ, 41, 251 (1985).

ՍԵՓԱԿԱՆ ՄԱԿԵՐԵՎՈՒՅԹԱՅԻՆ ՎԻՃԱԿՆԵՐԻ ԽՏՈՒԹՅՈՒՆԸ ԿԻՍԱՀԱՂՈՐԴՉԻ ՄԱԿԵՐԵՎՈՒՅԹԻ ՊԱՏԱՀԱԿԱՆ ԴԱՇՏՈՒՄ

Զ. Հ. ԿԱՍԱՄԱՆՅԱՆ, Մ. Ա. ՉԱԼԱԲՅԱՆ

Կիսահաղորդչի համար երկգոտի մոտավորությամբ ստացված է մակերևույթային վիճակների միջինացված բաշխումը ըստ ամբողջ արգելված գոտու։ Մակերևույթի պատահական դասավորված պոտենցիալ պատի մոդելում այն ունի բնութագրական մաքսիմումներ արգելված գոտու եզրերում։ Մակերևույթի պոտենցիալի համեմատաբար սահուն փոփոխման մոդելում այդ բաշխումը դեֆորմացված է, և արգելված գոտու ներսում կարող են ի հայտ գալ սեփական մակերևույթային վիճակների միջինացված խտության մաքսիմումներ։

THE DENSITY OF INTRINSIC SURFACE STATES IN THE RANDOM FIELD OF SEMICONDUCTOR SURFACE

Z. A. KASAMANYAN, M. A. CHALABYAN

The distribution of the average density of surface states over all the forbidden band is obtained in the two-zone semiconductor model. In the model of randomly located surface potential wall it has characteristic maxima near the forbidden band edges. The distribution deforms at relatively smooth variation of the surface potential, and some extra maxima in the average density of intrinsic surface states may appear within the forbidden band.

Изв. АН Армянской ССР, Физика, т. 23, вып. 6, 328— (1988)

УДК 537.226.33

О ВОЗМОЖНОСТИ ОБРАЗОВАНИЯ КОЛЛЕКТИВНОГО СОСТОЯНИЯ ФРЕНКЕЛЕВСКИХ ЭКСИТОНОВ

Х. В. НЕРКАРАРЯН

НПО «Лазерная техника», ЕГУ

(Поступило в редакцию 6 марта 1988 г.)

Обсуждается возможность образования коллективного состояния френкелевских экситонов в результате перехода системы в сегнетоэлектрическую фазу. Указанное состояние может возникнуть, когда в каждой элементарной ячейке имеются два достаточно близко расположенных энергетических уровня, куда переходит возбужденный электрон.

К настоящему времени хорошо изучены коллективные свойства экситонов Ванье-Мотта в полупроводниках и в частности условия образования электронно-дырочной жидкости [1—3]. Здесь мы обсудим возможность образования коллективного состояния френкелевских экситонов. Вопрос этот непосредственно связан с выявлением конкретного механиз-