

сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
Дубна

1091 / 2-80

18/3-80

P17 - 12930

Б.Д.Кандиларов¹, М.Т.Приматарова², И.С.Стойнова

К ТЕОРИИ СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ
НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА В ГЕТЕРОПЕРЕХОДЕ
МЕЖДУ ДВУМЯ ДВУХАТОМНЫМИ
ПОЛУПРОВОДНИКАМИ

¹ Институт ядерных исследований и ядерной энергетики БАН, София.

² Институт физики твердого тела БАН, София.

1979

Кандиларов Б.Д., Приматарова М.Т.,
Стоянова И.С.

P17 - 12930

К теории связанных состояний на границе раздела в гетеропереходе между двумя двухатомными полупроводниками

Рассматривается одномерная модель гетероперехода между двухатомными полупроводниками типа АВ-ВС с δ -потенциалами. Предполагается, что поверхность раздела совпадает с плоскостью атомов, которые одновременно принадлежат двум кристаллам. Развита теория связанных состояний на поверхности раздела на основе S -матричного подхода Саксона-Хатнера. Получено условие существования этих состояний, проведено его аналитическое исследование и сформулированы соответствующие правила запрета.

На основе численного анализа дана графическая интерпретация условия существования связанных состояний на границе раздела при помощи кривых $V-y^2/V$ - отношение решеточных констант, y^2 - величина потенциального скачка на поверхности раздела/.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований, Дубна 1978

Kandilarov B.D., Primatarova M.T.,
Stoianova I.S.

P17 - 12930

Interface States in a Heterojunction Between
Diatomic Semiconductors

The theory of interface states in heterojunctions between diatomic semiconductors is developed on the basis of an one-dimensional model and in the framework of the S -matrix approach. The condition for the existence of interface states is explicitly derived for the case of АВ-ВС -type heterojunctions. Numerical analysis is also performed and the general features of the problem are discussed.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubno 1979

© 1979 Объединенный институт ядерных исследований Дубна

1. ВВЕДЕНИЕ

Гетеропереходы между двухатомными кристаллами стали предметом повышенного интереса еще с самого начала исследований полупроводниковых гетеропереходов^{/1-4/}. Интерес к ним не прерывно увеличивается, особенно в связи с их применением /например, GaP-GaAs, CdS-CdSe, GaAs-ZnSe и т.д./ в полупроводниковой электронике^{/5-7/}. Что касается теории состояний на границе раздела, то она долгое время ограничивалась самыми простыми одномерными моделями эпитаксиального контакта между двумя одноатомными кристаллами^{/8-10/} или между одноатомным и двухатомным кристаллом^{/11/}. Несмотря на то, что в последнее время были выдвинуты теории, которые выходят за пределы одномерных моделей^{/12-14/}, необходимость в учете специфики эпитаксиального контакта между двумя двухатомными кристаллами заставляет рассматривать модели, хотя и одномерные, при которых явно учитывается наличие атомов двух сортов в каждом из эпитаксиально-выращенных кристаллов. В этом случае в зависимости от условий выращивания гетероперехода возможны два типа поверхности раздела: а/ поверхность раздела, определяющаяся идеализированной /фиктивной/ поверхностью, проходящей между последней атомной поверхностью кристалла-подложки и первой атомной плоскостью эпитаксиально-выращенного на ней кристалла /поверхность раздела I рода/; б/ поверхность раздела, совпадающая с плоскостью атомов, которые одновременно принадлежат двум кристаллам /поверхность раздела II рода, возникающая, например, в случае гетеропереходов типа GaP-GaAs, CdSe-CdTe. В последнее время теория состояний на границе раздела в гетеропереходах I рода была развита нами^{/15/}.

Целью настоящей работы является исследование условия существования связанных состояний на границе раздела в гетеропереходах с разделительной поверхностью II рода /аналогичный случай гетеропереходов типа А-АВ, таких, например, как CdSe-Se, рассмотрен в работе^{/16/}. Для решения поставленной задачи в данной работе используется S -матричный подход Саксона-Хатнера^{/17,18/}.

2. МОДЕЛЬ И ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ

Рассмотрим полупроводниковый гетеропереход типа АВ-ВС /рис.1/. Контакт между двумя полубесконечными кристаллами характеризуется наличием потенциального скачка $-eV_0$.

Потенциальная энергия электрона в полубесконечном кристалле ($x \geq 0$) есть

$$(E_{\text{pot}})_r = \frac{\hbar^2}{m} \left\{ U_{r2} \sum_{n=0}^{\infty} \delta(x-2na) + U_{r1} \sum_{n=0}^{\infty} \delta[x-(2n+1)a] \right\}, \quad /1/$$

и в полубесконечном кристалле ($x < 0$) она дается выражением

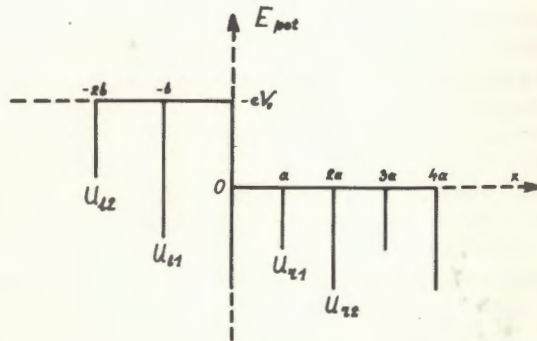
$$(E_{\text{pot}})_l = \frac{\hbar^2}{m} \left\{ U_{l2} \sum_{n=1}^{\infty} \delta(x+2nb) + U_{l1} \sum_{n=0}^{\infty} \delta[x+(2n+1)b] \right\}, \quad /2/$$

причем $(E_{\text{pot}})_l$ надо измерять от уровня $-eV_0$, и для рассматриваемого гетероперехода

$$aU_{r2} = bU_{l2} \quad /3/$$

Конечно, общий атом В, которым в сущности определяется поверхность контакта, может быть с одинаковым успехом, причислен к любому из двух полубесконечных кристаллов. На рис. 1 для определенности он причислен к "правому" кристаллу.

Рис. 1. Одномерная модель гетероперехода между двумя двухатомными полупроводниками с разделительной поверхностью II рода. Решеточные константы кристаллов суть $2a$ и $2b$, а величины $U_{ji} / j=r, l; i=1, 2/-$ характеристики потенциалов соответствующих атомов.

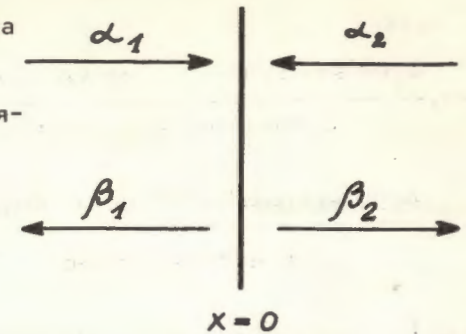


Общее решение уравнения Шредингера для "правого" и "левого" кристалла запишем в виде линейной суперпозиции двух линейно-независимых блоховских волн ϕ , ϕ^* , распространяющихся направо и налево соответственно /17,18/ :

$$\psi_r(x) = a_2 \frac{\phi_r^*(x)}{\phi_r^*(0)} + \beta_2 \frac{\phi_r(x)}{\phi_r(0)}, \quad /4/$$

$$\psi_l(x) = a_1 \frac{\phi_l(x)}{\phi_l(0)} + \beta_1 \frac{\phi_l^*(x)}{\phi_l^*(0)}.$$

Рис. 2. Поверхность раздела как рассеиватель. a_1 и a_2 / β_1 и $\beta_2 /$ суть амплитуды входящих /исходящих/ волн.



Здесь константы a_1 /соответственно β_1 / связаны с амплитудами входящих /исходящих/ волн /рис. 2/.

Выражение для функции $\psi_r(x)$, полученное в /19/, в наших обозначениях имеет вид

$$\begin{aligned} \psi_r(x) = & \frac{\phi_r^*(0) [e^{-2ia\mu} \sin kx - \sin k(x-2a)] + \delta_r \phi_r^*(a) [\sin k(x+a) - e^{2ia\mu} \sin k(x-a)]}{\phi_r^*(0) \sin 2ak + \delta_r \phi_r^*(a) (1 + e^{2ia\mu}) \sin ak} + \\ & + \beta_2 \frac{\phi_r(0) [e^{2ia\mu} \sin kx - \sin k(x-2a)] + \delta_r \phi_r(a) [\sin k(x+a) - e^{-2ia\mu} \sin k(x-a)]}{\phi_r(0) \sin 2ak + \delta_r \phi_r(a) (1 + e^{-2ia\mu}) \sin ak}, \quad /5/ \end{aligned}$$

где мы положили $\delta_r = U_{r1} / U_{r2}$, а значения функции $\phi_r(x)$ в точках $x=0$ и $x=a$ связаны соотношением

$$\phi_r(0) = \phi_r(a) \frac{\cos a\mu e^{-ia\mu}}{\cos ak + \frac{aU_{r2}}{k} \sin ak} \quad /6/$$

В /5/ $\hbar\mu$ есть квазиимпульс электрона, и для его энергии E мы имеем

$$E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad /7/$$

Для функции $\psi_l(x)$, используя выражение блоховской волны, распространяющейся вдоль бесконечной одномерной двухатомной решетки /17/, аналогичное /5/, мы получаем

$$\psi_{\ell}(x) = \frac{\phi_{\ell}(0)[\sin \lambda(x+2b) - e^{-2ib\nu} \sin \lambda x] + \delta_{\ell} \phi_{\ell}(-b)[e^{2ib\nu} \sin \lambda(x+b) - \sin \lambda(x-b)]}{\phi_{\ell}(0) \sin 2b\lambda + \delta_{\ell} \phi_{\ell}(-b)(1 + e^{2ib\nu}) \sin b\lambda} + \beta_1 \frac{\phi_{\ell}^*(0)[\sin \lambda(x+2b) - e^{2ib\nu} \sin \lambda x] + \delta_{\ell} \phi_{\ell}^*(-b)[e^{-2ib\nu} \sin \lambda(x+b) - \sin \lambda(x-b)]}{\phi_{\ell}^*(0) \sin 2b\lambda + \delta_{\ell} \phi_{\ell}^*(-b)(1 + e^{-2ib\nu}) \sin b\lambda} \quad /8/$$

где $\hbar v$ есть квазиимпульс электрона, движущегося в левом кристалле, и мы положили $\delta_{\ell} = U_{\ell 1} / U_{\ell 2}$. Для значений функции $\phi_{\ell}(x)$ в точках $x=0$ и $x=-b$ имеем

$$\phi_{\ell}(0) = \phi_{\ell}(-b) \frac{\cos b\nu e^{ib\nu}}{\cos b\lambda + \frac{bU_{\ell 2}}{\lambda} \sin b\lambda} \quad /9/$$

а энергетические параметры λ и k связаны соотношением

$$\lambda^2 = k^2 + (2meV_0) / \hbar^2 \quad /10/$$

Теперь мы уже в состоянии построить соответствующую S - или R - матрицу рассеяния на гетеропереходе и тем самым получить условие существования локализованных состояний на границе раздела в терминах R -матрицы.

3. ПОСТРОЕНИЕ R -МАТРИЦЫ ГЕТЕРОПЕРЕХОДА И КРИТЕРИЙ СУЩЕСТВОВАНИЯ СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ НА ГРАНИЦЕ РАЗДЕЛА

Как хорошо известно, условие существования связанных состояний эквивалентно условию сингулярности соответствующей S -матрицы совместно с ограничительным условием о положительности мнимой части квазиимпульса^{17/} /см. также^{18,15/} /. Таким образом, условие существования "контактных" состояний, локализованных на границе раздела, определяется условием сингулярности S -матрицы гетероперехода при дополнительном условии, чтобы полученный таким образом уровень находился в общей энергетической щели двух, эпитаксиально связанных кристаллов^{8,15/}. В самом деле, вместо S -матрицы

$$\begin{pmatrix} \beta_1 \\ \beta_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix} \quad /11/$$

удобнее пользоваться т.н. R -матрицей

$$\begin{pmatrix} \beta_2 \\ a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} \\ R_{21} & R_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ \beta_1 \end{pmatrix} \quad /12/$$

связанной с S -матрицей взаимно-однозначным соотношением

$$S = R_{22}^{-1} \begin{pmatrix} -R_{21} & 1 \\ \det R & R_{12} \end{pmatrix} \quad /13/$$

Ясно, что условие сингулярности S -матрицы эквивалентно условию

$$R_{22} = 0 \quad /14/$$

а ограничительное условие, накладываемое на квазиимпульс, можно записать в виде

$$\begin{aligned} \mu &= n_r \pi / 2a + i\xi; & \xi > 0, & n_r = 1, 2, \dots, \\ \nu &= n_{\ell} \pi / 2b + i\eta; & \eta > 0, & n_{\ell} = 1, 2, \dots \end{aligned} \quad /15/$$

Здесь через n_r и n_{ℓ} обозначены номера энергетических щелей /лакун/ двух кристаллов.

Матричные элементы R -матрицы гетероперехода мы получим, как обычно, из граничных условий, накладываемых на волновые функции и их производные на границе раздела $x=0$.

$$\psi_{\ell}(0) = \psi_r(0),$$

$$\psi_r'(0) - \psi_{\ell}'(0) = 2aU_{r2} \psi_r(0). \quad /16/$$

Тогда условие /14/ мы можем записать в виде

$$\frac{\lambda \sin 2b\nu}{(1 + \frac{bU_{\ell 1}}{\lambda} \operatorname{tg} b\lambda) \sin 2b\lambda} = - \frac{k \sin 2a\mu}{(1 + \frac{aU_{r1}}{k} \operatorname{tg} a\lambda) \sin 2a\lambda} \quad /17/$$

Преобразуем далее /17/, используя соотношение Кронига-Пенни в случае двухатомного кристалла:

$$\cos^2 a\mu = \left(\cos ak + \frac{aU_{r1}}{k} \sin ak \right) \left(\cos ak + \frac{aU_{r2}}{k} \sin ak \right), \quad /18/$$

$$\cos^2 b\nu = \left(\cos b\lambda + \frac{bU_{l1}}{\lambda} \sin b\lambda \right) \left(\cos b\lambda + \frac{bU_{l2}}{\lambda} \sin b\lambda \right),$$

имея в виду при этом, что μ и ν принадлежат соответствующим энергетическим щелям, т.е. что выполняются также условия /15/. Переходя к новым переменным и новым параметрам

$$\begin{aligned} x &= ak, & A_{r1} &= -a^2 U_{r1}, \\ y &= a\lambda, & A_{l1} &= -b^2 U_{l1}, \end{aligned} \quad i=1,2, \quad /19/$$

$$B = b/a,$$

где A_{r1}, A_{l1} принадлежат интервалу /0,1/, представим /17/ в виде

$$W_{\pm}(By, A_{l1}, A_{l2}) = -BW_{\mp}(x, A_{r1}, A_{r2}), \quad /20a/$$

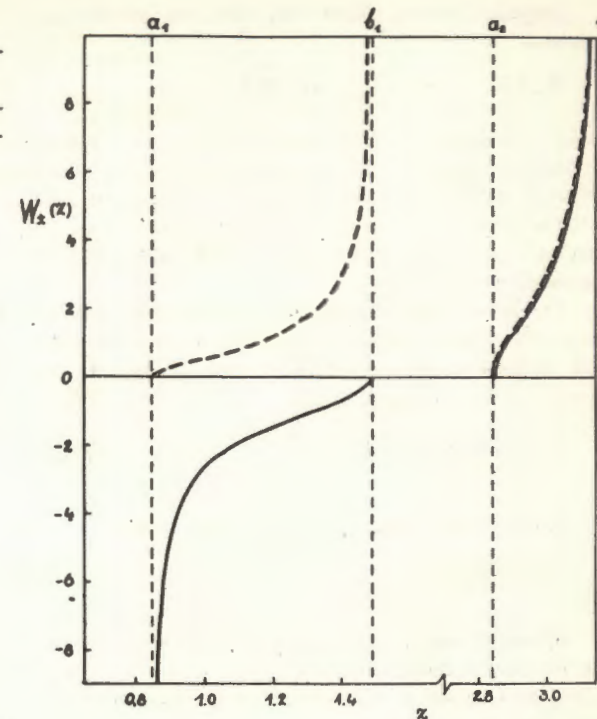
$$W_{\pm}(By, A_{l1}, A_{l2}) = -BW_{\pm}(x, A_{r1}, A_{r2}). \quad /20б/$$

Выражения для функций W_{\pm} следующие:

$$\begin{aligned} W_{\pm}(z, A_{j1}, A_{j2}) &= (-1)^{n_j} (z - A_{j2} \operatorname{tg} z) \times \\ &\times \sqrt{\frac{A_{j1} A_{j2} - z^2 - z(A_{j1} + A_{j2}) \operatorname{ctg} z}{(z - A_{j1} \operatorname{tg} z)(z - A_{j2} \operatorname{tg} z)}}. \end{aligned} \quad /21/$$

Здесь $j=r$ приводит к $z=x$; $j=l$ - к $z=By$ и функция W_{+} соответствует четным значениям $n_j (j=r, l)$, а W_{-} - нечетным. Таким образом, равенство /20а/ дает локализованные уровни на стыке двух запрещенных зон с противоположной четностью /уровни типа Е.Зртса /8/ /, а равенство /20б/ - соответствующие уровни на стыке двух запрещенных зон с одинаковой четностью. Таким образом, /20б/ определяет локализованные уровни "неэртсовского" типа, и мы особо отметим, что наличие обоих типов состояний встречается также при гетеропереходах между двумя двухатомными полупроводниками с разделительной поверхностью I рода /15/.

Рис. 3. График функций W_{\pm} . Сплошная /пунктирная/ линия соответствует выбору параметров $A_{j1}=0,750$ и $A_{j2}=0,125$ / $A_{j1}=0,125$ и $A_{j2}=0,750$ /. a_1 и b_1 являются нижней и верхней границами первой запрещенной зоны соответственно, а a_2 и π - второй.



Исследуем теперь поведение функций W_{\pm} . Легко показать, что

$$\lim_{z \rightarrow \pi} W_{+}(z, A_{j1}, A_{j2}) = \sqrt{A_{j1} A_{j2} - z^2 - z(A_{j1} + A_{j2})}. \quad /22/$$

Очевидно, это выражение инвариантно относительно замены $A_{j1} \rightarrow A_{j2}$. В рассматриваемом нами случае W_{+} имеет тот же самый вид, что и в случае разделительной поверхности I рода /см. равенство /23/ в работе /15/.

Используя соотношения Кронига-Пенни /18/, можно определить знак функций W_{+} и W_{-} . Поскольку этот знак совпадает со знаком выражения $(-1)^{n_j} (z - A_{j2} \operatorname{tg} z)$, можно разграничить следующие случаи.

1. Пусть n_j - нечетное, тогда или $a/A_{j1} < A_{j2}$ и, следовательно, $W_{-}(z, A_{j1}, A_{j2}) > 0$, или $b/A_{j1} > A_{j2}$ и $W_{-}(z, A_{j1}, A_{j2}) < 0$.
2. Пусть n_j - четное, тогда функция $W_{+}(z, A_{j1}, A_{j2})$ всегда положительна.

Поведение функций W_{\pm} показано на рис. 3 для конкретных значений параметров $A_{ji} (j=r, l; i=1,2)$.

Видно, таким образом, что из уравнения /20б/ на самом деле только

$$W_{-}(By, A_{\ell 1}, A_{\ell 2}) = -BW_{-}(x, A_{r1}, A_{r2}) \quad /20б/$$

имеет решения. С физической точки зрения это означает, что в случае общей запрещенной зоны, возникающей из двух нечетных лагун, возможно существование состояния на поверхности раздела и что в рассматриваемом здесь случае "запрет Эртса" действует только по отношению "контакта" двух четных запрещенных зон.

Условие существования связанных состояний на поверхности раздела /20/ является слишком неудобным для непосредственной физической интерпретации, и мы рассмотрим его на основе $B-\gamma^2$ соотношения, где

$$\gamma^2 = -a^2 m e V_0 / \hbar^2. \quad /23/$$

В соответствии с /23/ равенство /10/ примет вид

$$y^2 = x^2 - 2\gamma^2. \quad /24/$$

Прежде чем перейти к интерпретации условия /20/ на основе численного анализа, сделаем еще некоторые общие выводы. Так, если значения x соответствуют энергиям из первой запрещенной зоны правого кристалла и если выполняется неравенство $A_{r1} > A_{r2}$, то для того, чтобы существовали связанные состояния с этим x , а/ когда By /энергия электрона в левом кристалле/ принадлежит первой запрещенной зоне, необходимо еще выполнение неравенства $A_{\ell 1} / A_{r2} < B < 1 / A_{r2}$, и б/ когда By принадлежит второй лагуне, необходимо еще $0 < B < 1 / A_{r2}$. Если, однако, x принадлежит первой лагуне, но $A_{r1} < A_{r2}$, то By может принадлежать только первой запрещенной зоне и для существования связанных состояний необходимо еще выполнение условия $0 < B < A_{\ell 1} / A_{r2}$. Соответственно для значений x , принадлежащих второй запрещенной зоне, и при произвольном соотношении между величинами A_{r1} и A_{r2} величина By может лежать только в первой запрещенной зоне левого кристалла и необходимо выполнение условия $0 < B < A_{\ell 1} / A_{r2}$ /мы везде учитывали, что $A_{\ell 2} = B A_{r2}$, см. /3//.

4. ЧИСЛЕННЫЙ АНАЛИЗ И ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

В соответствии с уже установленной практикой графически интерпретировать условия существования состояний на границе

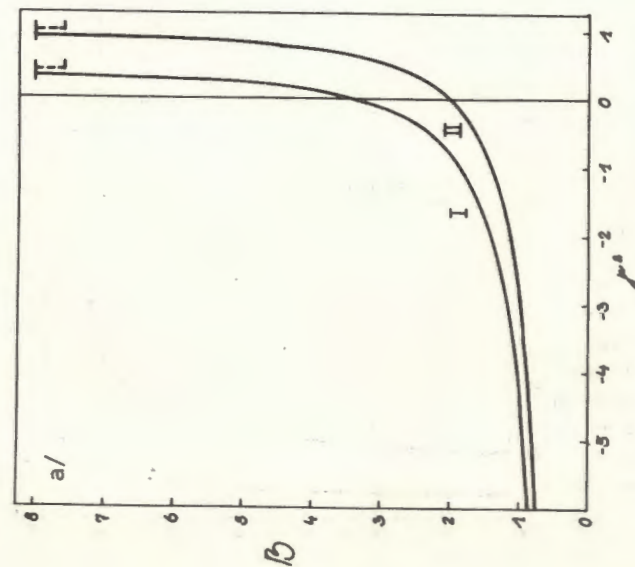
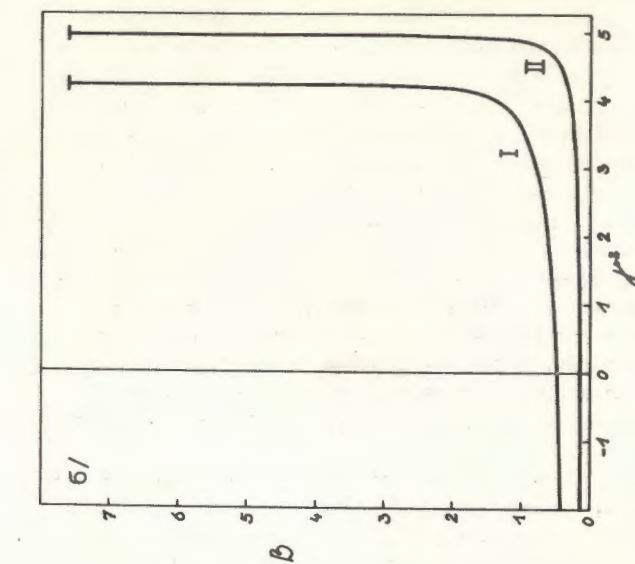


Рис. 4. $B-\gamma^2$ соотношения при $A_{r1} = 0,750$, $A_{r2} = 0,125$ и $A_{\ell 1} = 0,950$. Сплошные линии соответствуют уравнению /20а/, а пунктирные - уравнению /20б//; а/ кривая 1 получена для $x = 0,90$, а кривая 2 - для $x = 1,40$; б/ кривая 1 получена для $x = 2,90$, а кривая 2 - для $x = 3,14$.

раздела мы здесь воспользуемся т.н. $B-\gamma^2$ соотношениями, которые дадут нам возможность самым естественным образом связать критерий существования с такими основными характеристиками гетероперехода, как величина потенциального скачка на поверхности раздела γ^2 и отношение решеточных констант $B=b/a$. Таким образом, используя /20/ и /24/, для каждого фиксированного значения x мы можем получить соответствующее $B-\gamma^2$ соотношение. То, что мы получаем, есть на самом деле множество гетеропереходов, для которых существует связанное состояние на границе раздела с выбранным значением x . Следовательно, если данное состояние на поверхности раздела, характеризуемое соответствующей энергией, существует в данном конкретном гетеропереходе, характеризуемом со своей стороны значением пары (B, γ^2) и параметров A_{ji} , то точка (B, γ^2) должна лежать на кривой $B-\gamma^2$, проведенной для того же значения x и при соответствующих значениях A_{ji} ($j=r, l; i=1,2$).

На рис. 4 и рис. 5 представлены $B-\gamma^2$ соотношения для гетероперехода между двумя двухатомными полупроводниками при конкретном выборе параметров A_{ji} . На рис. 4а и рис. 5а представлены $B-\gamma^2$ соотношения для значений x , принадлежащих первой лакуне правого кристалла, а на рис. 4б и рис. 5б

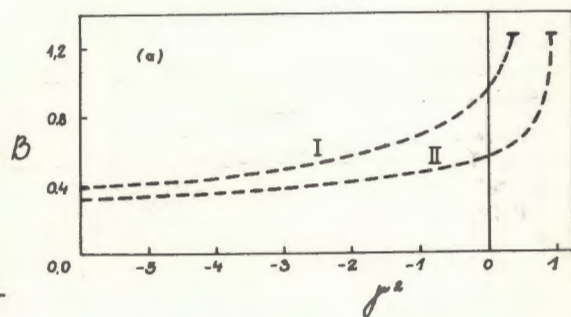
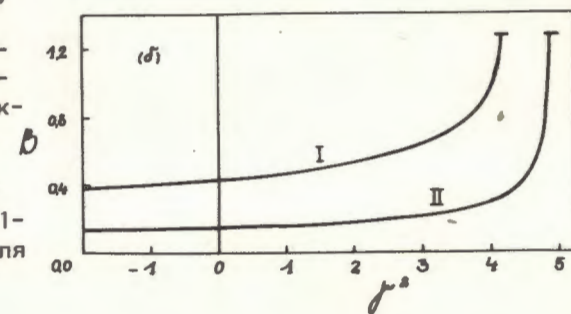


Рис. 5. $B-\gamma^2$ соотношения для $A_{r1}=0,125$, $A_{r2}=0,750$ и $A_{l1}=0,950$. Сплошные линии определены уравнением /20а/, а пунктирные - уравнением /20б/; а/кривые 1 - для $x=0,90$, 2 - для $x=1,40$; б/кривые 1 - для $x=2,90$; 2 - для $x=3,14$.



те же самые соотношения для значений x , принадлежащих его второй запрещенной зоне. Надо отметить, что с физической точки зрения особый интерес представляет узкий интервал значений около точки $B=1$, так как практически осуществляемые случаи эпитаксиального выращивания одного кристалла на другом реализуются при различии решеточных констант, составляющем не более чем несколько процентов.

ЛИТЕРАТУРА

1. Anderson R.L. IBM J.Res.Developm.,1960,4, p.283.
2. Anderson R.L. Solid State Electronics,1962,5,p.341.
3. Aven M.,Garwacki W. J.Electrochem.Soc.,1963,110,p.401.
4. Kandilarov B.,Andreytchin R. phys.stat.sol.,1965, 8,p.897.
5. Милнс А., Фойхт Д. Гетеропереходы и переходы металл-полупроводник. Изд. "Мир", М., 1975.
6. Алферов Ж.И. и др. ФТТ, 1966, 8, с.3513.
7. Anderson R.L.phys.stat.sol.,1969,34, p.385.
8. Aerts E.Physica,1960, 26, p.1063.
9. Kandilarov B.D.,Primatarova M.T.J.Phys.C.,1979, 12, p.L463.
10. Kandilarov B.D.,Detcheva V.,Primatarova M.P. J.Phys.C., 1979, C12, p.3401.
11. Kandilarov B.D.,Detcheva V.,Petrova P.C.phys.stat.sol.(b) 1975,70,p.775.
12. Baraff G.A.,Appelbaum J.A.,Hamann D.R. Phys.Rev.Lett., 1977, 38, p.237.
13. Kandilarov B.D.,Detcheva V.J.Phys.C.,1977,C10, p.1703.
14. Pickett W.E.,Louie S.G.,Cohen M.L.Phys.Rev.B,1978, 17, p.815.
15. Kandilarov B.D.,Primatarova M.T., Detcheva V. Internal Report IC/79/130, Trieste,1979.
16. Кандиларов Б.Д., Герова Е. Докл.БАН /в печати/.
17. Saxon D.S.,Hutner R.A. Philips Res.Rep.,1949,4,p.81.
18. Sachs M.Solid State Theory, McGraw-Hill, N.Y., 1963.
19. Aerts E.Physica, 1960, 26, p.1057.
20. Павлов Б.С., Смирнов Н.В. Вестн. Ленингр.унив., 1977, №3, ч.3, с.71.

Рукопись поступила в издательский отдел
16 ноября 1979 года.