

## ИНТЕРФЕЙСНЫЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ

А.А.Горбачевич, И.В.Токатлы

Московский институт электронной техники, 103498 Зеленоград, Московская обл., Россия

Поступила в редакцию 3 декабря 1997 г.

После переработки 5 февраля 1998 г.

Показана возможность существования нового типа электронных состояний, локализованных на гетероинтерфейсе с энергией внутри запрещенной зоны. Интерфейсные состояния могут быть связаны с поверхностными таммовскими состояниями в материалах, образующих гетероинтерфейс, но могут возникать и в отсутствие поверхностных состояний в исходных материалах. В плоскости гетероперехода энергетический спектр интерфейсных состояний формирует двухмерную зону.

PACS: 73.20.-г

Через семнадцать лет после того, как в 1932 г. Тамм продемонстрировал наличие особого типа поверхностных состояний, локализованных вблизи поверхности кристалла [1], в работе Джеймса [2] было высказано предположение о возможности существования аналогичных состояний и вблизи интерфейса, соединяющего два различных материала. Насколько нам известно, следующее упоминание о возможных интерфейсных состояниях, подобных таммовским уровням, относится только к 1992 г. [3]. Как и поверхность, интерфейс из-за разрыва параметров материала представляет собой сильное возмущение. Энергия таких локализованных состояний может попадать как в разрешенную, так и в запрещенную зону объемного закона дисперсии. В последнем случае локализованные на интерфейсе состояния будут проявлять себя как донорная или акцепторная примесь. С ними, в частности, может быть связано необычное поведение носителей заряда в гетероструктурах на основе InAs/AlSb [3]. В работах [4, 5] было показано, что на интерфейсе действительно могут существовать локализованные состояния ("пограничные состояния"), однако энергия пограничных состояний всегда лежит в области непрерывного спектра (в области скачка краев зон граничащих материалов). В настоящее время описан только один тип весьма специфических интерфейсных состояний с энергией внутри запрещенной зоны. А именно, состояния на инверсном контакте [6], возникающие вследствие локального обращения в нуль запрещенной зоны в точке контакта. Упомянутые результаты были получены в непрерывном пределе в рамках стандартного метода огибающей. Для описания сильных возмущений, локализованных на масштабах, сравнимых с межатомным расстоянием, более последовательным представляется подход на основе приближения сильной связи. В рамках такого подхода в настоящей работе получены условия существования локализованных на интерфейсе состояний с энергией внутри запрещенной зоны. Показано, что в общем случае имеется два типа локализованных интерфейсных состояний. Первый генетически связан с поверхностными состояниями в материалах, образующих интерфейс. Локализованные интерфейсные состояния второго типа возникают и в отсутствие поверхностных уровней в каждом из материалов гетеропары и всецело обусловлены специфической структурой интерфейса. В качестве конкретного примера рассмотрены состояния,

возникающие на интерфейсе между двумя кубическими полупроводниками со структурой алмаза или цинковой обманки.

1. Рассмотрим атомно-гладкий интерфейс между двумя кристаллами. Пусть ось роста структуры совпадает с осью  $z$ . В меру однородности системы в плоскости, перпендикулярной оси роста, задача оказывается эффективно одномерной. Будем нумеровать элементарные ячейки целыми числами  $n$ . Левому кристаллу отвечают номера  $n \leq 0$ , а правому, соответственно,  $n \geq 1$ . Выпишем уравнение Шредингера в базисе сильной связи. Пусть, для определенности, размерность базиса, отвечающего одной элементарной ячейке, равна  $M$ . То есть, каждая элементарная ячейка содержит  $M$  орбиталей и, следовательно, волновая функция  $\Psi_n$  в этом базисе представляет собой вектор размерности  $M$ . Уравнение Шредингера в приближении сильной связи (в том смысле, что мы учитываем перескоки только между соседними ячейками) имеет вид

$$h_l \Psi_n^l + T_l \Psi_{n+1}^l + T_l^+ \Psi_{n-1}^l = E \Psi_n^l, \quad n \leq -1, \quad (1)$$

$$h_r \Psi_n^r + T_r \Psi_{n+1}^r + T_r^+ \Psi_{n-1}^r = E \Psi_n^r, \quad n \geq 2. \quad (2)$$

В формулах (1) и (2)  $h_j$  ( $j = l, r$ ) - гамильтониан элементарной ячейки, а  $T_j$  - матрица интегралов перескока между состояниями соседних ячеек. Отметим, что для трехмерной системы матрицы  $h_j$  и  $T_j$  зависят от поперечного волнового вектора.

Уравнения для крайних (интерфейсных) ячеек с номерами  $n = 0$  и  $n = 1$  отличаются от (1) и (2) в меру неэквивалентности перескоков вправо и влево:

$$h_l \Psi_0^l + T_S \Psi_1^r + T_l^+ \Psi_{-1}^l = E \Psi_0^l, \quad (3)$$

$$h_r \Psi_1^r + T_r \Psi_2^r + T_S^+ \Psi_0^r = E \Psi_1^r, \quad (4)$$

где  $T_S$  - матрица перескоков между состояниями интерфейсных ячеек. Уравнения (3) и (4) можно переписать в более компактной форме. Определим формально функцию  $\Psi_1^l$ , удовлетворяющую уравнению для левого полупространства (1) на узле с  $n = 1$  и функцию  $\Psi_0^r$ , удовлетворяющую уравнению для правого полупространства (2) на узле с  $n = 0$ . Добавляя к правой и левой частям (3) и (4) величины  $T_l \Psi_1^l$  и  $T_r^+ \Psi_0^r$ , соответственно, получим следующие соотношения:

$$T_S \Psi_1^r = T_l \Psi_1^l, \quad (5)$$

$$T_S^+ \Psi_0^r = T_r^+ \Psi_0^r. \quad (6)$$

Отметим, что аналогичная процедура была использована в [7] при получении граничных уравнений для одноорбитальной одномерной цепочки. Соотношения (5) и (6) фактически представляют собой граничные условия к уравнениям (1) и (2), определяющим волновые функции в правом и левом полупространствах. В отсутствие интерфейсного перескока ( $T_S = 0$ ) уравнения (1) и (5) и уравнения (2) и (6), соответственно, определяют собственные функции невзаимодействующих правого и левого полуограниченных кристаллов. Хорошо известно, что среди собственных функций полуограниченного кристалла, помимо делокализованных зонных состояний, возможно возникновение поверхностных таммовских состояний, локализованных вблизи границы. Наличие перескоков между правым и левым полупространствами ( $T_S \neq 0$ ) ведет, во-первых, к появлению туннельной связи между поверхностными состояниями, генетически связанными с правым и левым кристаллами.

Во-вторых, могут появиться новые локализованные состояния, связанные, собственно, с наличием интерфейса и не сводящиеся к таммовским уровням изолированных кристаллов.

2. Продемонстрируем указанные возможности на примере интерфейса между двумя кубическими кристаллами со структурой алмаза или цинковой обманки. Именно такой структурой обладают наиболее распространенные полупроводники IV группы и соединения типа  $A^3B^5$ . Пусть ось роста структуры (для определенности,  $A_l^3B_l^5/A_r^3B_r^5$ )  $z$  совпадает с направлением (001). Исследуем возможность возникновения локализованных состояний, формирующихся из состояний валентной зоны с равным нулю импульсом, перпендикулярным оси роста:  $\mathbf{k}_\perp = 0$ . Эти состояния отвечают оси  $\Delta$  трехмерной зоны Бриллюэна и проецируются на  $\Gamma$ -точку двухмерной зоны Бриллюэна. Пренебрежем спин-орбитальным взаимодействием. Это существенно упрощает выкладки, но совершенно не меняет качественные результаты.

Спектр валентной зоны на оси  $\Delta$  (001) состоит из двух зон. Верхняя двукратно вырожденная (без учета спина) зона сформирована из  $|X\rangle$  и  $|Y\rangle$  атомных орбиталей. Вторая зона отвечает смеси  $|Z\rangle$  и  $|S\rangle$  состояний. Рассмотрим локализованные состояния, формирующиеся из  $|X\rangle$  и  $|Y\rangle$  атомных состояний, независимых на оси  $\Delta$  от состояний второй зоны. В этом случае каждая элементарная ячейка правого и левого полупространств содержит четыре орбитали:  $|X_B\rangle$ ,  $|Y_B\rangle$ ,  $|X_A\rangle$ ,  $|Y_A\rangle$ . Покажем, что рассматриваемая система эквивалентна контакту между двумя пайерловскими цепочками с альтернированными связями и узельными энергиями.

Внутриячеечный гамильтониан  $h_j$  ( $j = l, r$ ) и матрицы перескоков  $T_\alpha$  ( $\alpha = l, r, S$ ), фигурирующие в уравнениях (1), (2) и граничных условиях (5), (6), можно представить в виде [8]

$$h_j = \begin{bmatrix} E_B^j & t_{zx}^j - \sigma_x t_{xy}^j \\ t_{xx}^j - \sigma_x t_{xy}^j & E_A^j \end{bmatrix}, \quad T_\alpha = \begin{bmatrix} 0 & t_{xx}^\alpha + \sigma_x t_{xy}^\alpha \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (7)$$

где  $E_B^j$  и  $E_A^j$  – энергии  $p$ -состояний атомов В и А в  $j$ -ом полупространстве,  $t_{xx}^\alpha$  и  $t_{xy}^\alpha$  соответственно интегралы перескока между одноименными и разноименными орбиталями атомов В и А типов. Недиagonальные  $2 \times 2$  блоки матриц (7) диагонализуются унитарным преобразованием с матрицей

$$U = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} \sigma_x + \sigma_z & 0 \\ 0 & \sigma_x + \sigma_z \end{bmatrix}.$$

Это преобразование отвечает переходу от базиса  $|X\rangle$ ,  $|Y\rangle$  к базисным функциям

$$|\Delta_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|X\rangle + |Y\rangle), \quad |\Delta_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|X\rangle - |Y\rangle),$$

соответствующим представлениям  $\Delta_3$  и  $\Delta_4$ . Преобразованные матрицы  $h'_j$  и  $T'_\alpha$  поблочно диагональны:

$$h'_j = U h_j U^+ = \begin{bmatrix} E_B^j & t_{zx}^j - \sigma_z t_{xy}^j \\ t_{xx}^j - \sigma_z t_{xy}^j & E_A^j \end{bmatrix}, \quad T'_\alpha = U T_\alpha U^+ = \begin{bmatrix} 0 & t_{xx}^\alpha + \sigma_z t_{xy}^\alpha \\ 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (8)$$

Выпишем в явном виде систему уравнений для компонент биспинора  $(\Psi_n^j)^T = (u_n^j, v_n^j)$ :

$$(E_B^j - E)u_n^j + (t_{zx}^j - \sigma_z t_{xy}^j)v_n^j + (t_{xx}^j + \sigma_z t_{xy}^j)v_{n+1}^j = 0,$$

$$(E_A^j - E)v_n^j + (t_{xx}^j - \sigma_z t_{xy}^j)u_n^j + (t_{xx}^j + \sigma_z t_{xy}^j)u_{n-1}^j = 0. \quad (9)$$

Четыре уравнения (9) распадаются на две несвязанные системы двух уравнений, описывающие состояния с симметрией  $\Delta_3$  и  $\Delta_4$  и отличающиеся знаком перед  $t_{xy}^j$ . Каждая из указанных систем уравнений описывает пайерлсовскую цепочку атомов, удвоенную как по связям, так и по узельным энергиям. Спектр делокализованных зонных состояний в  $j$ -ом кристалле имеет вид

$$E_{\pm}^j(k) = (E_A^j + E_B^j)/2 \pm \sqrt{(E_A^j - E_B^j)^2/4 + 4(t_{xx}^j)^2 \cos^2 k + 4(t_{xy}^j)^2 \sin^2 k/2}.$$

Нижняя (связывающая)  $p$ -зона  $E_-^j(k)$  отвечает двукратно вырожденной валентной зоне. Причем,  $E_-^j(0) = E_V^j$  – потолок валентной зоны, расположенный в  $\Gamma$ -точке. Антисвязывающая  $p$ -зона  $E_+^j(k)$  лежит выше зоны проводимости, соответствующей в  $\Gamma$ -точке антисвязывающему  $S$ -уровню.

Локализованные интерфейсные решения для каждого из представлений  $\Delta_3$  и  $\Delta_4$  будем искать в виде

$$\Psi_n^r = A \begin{pmatrix} u_r \\ v_r e^{q_r} \end{pmatrix} e^{-2nq_r} \quad ; \quad \Psi_n^l = B \begin{pmatrix} u_l \\ v_l e^{-q_l} \end{pmatrix} e^{2nq_l}. \quad (10)$$

Для определенности предположим, что на поверхность левого кристалла ( $j = l$ ) выходит плоскость атомов типа  $B_l$ , на поверхность правого ( $l = r$ ) – плоскость атомов  $A_r$ . Подставляя волновые функции (10) в граничные условия (5), (6), с учетом (8) и (9) получим следующие дисперсионные уравнения, определяющие энергии интерфейсных состояний:

$$F_{\pm}(E) = \gamma_{\pm}, \quad (11)$$

где

$$F_{\pm}(E) = \frac{(E_A^r - E)(E_B^l - E)}{(t_{\pm}^r e^{2q_r} - t_{\mp}^r)(t_{\pm}^l e^{2q_l} - t_{\mp}^l)}, \quad \gamma_{\pm} = \frac{(t_{\pm}^S)^2}{t_{\pm}^r t_{\pm}^l} \quad (12)$$

и  $t_{\pm}^{\alpha} = t_{xy}^{\alpha} \pm t_{xx}^{\alpha}$ . Верхний и нижний знаки в (11) и (12) отвечают состояниям  $\Delta_3$  и  $\Delta_4$  соответственно. Параметры затухания  $q_j$  связаны с энергией  $E$  соотношением

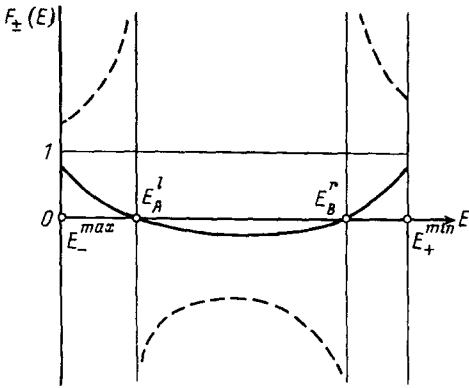
$$\sinh q_j = \sqrt{(E - E_-^j)(E_+^j - E)/4t_+^j t_-^j}. \quad (13)$$

Из (13) и (12) следует, что локализованные решения типа (10) существуют, только если энергия лежит в общей запрещенной зоне:  $E_-^{max} < E < E_+^{min}$ , где

$$E_+^{min} = \min\{E_+^l(0), E_+^r(0)\}, \quad E_-^{max} = \max\{E_-^l(0), E_-^r(0)\}.$$

Отметим, что энергия  $E_-^{max}$  соответствует реальному краю валентной зоны, тогда как уровень  $E_+^{min}$  лежит выше физического дна зоны проводимости  $E_c$ . Следовательно, решения уравнения (11) с энергиями  $E_c < E < E_+^{min}$  попадут в область разрешенных состояний.

Проанализируем возможные решения уравнения (11). Качественный вид функций  $F_{\pm}(E)$  для случая  $t_{xy} > 0$  представлен на рисунке. Функция  $F_+(E)$  обращается в нуль в точках  $E_A^l$  и  $E_B^r$ . Следовательно, в отсутствие интерфейсного перескока  $t^S = 0$  существуют поверхностные состояния типа  $\Delta_3$  на границах левого и правого



Качественный вид функций  $F_+(E)$  и  $F_-(E)$  для случая  $t_{xy}^j > 0$ . Сплошной линией изображена функция  $F_+(E)$ , а штриховой функция  $F_-(E)$ .

кристаллов с энергиями  $E_A^l$  и  $E_B^r$ , соответственно. С увеличением  $t^S$  интерфейсные уровни раздвигаются и исчезают (не обязательно одновременно) при достижении некоторых критических значений поверхностного интеграла перескока. Такое поведение соответствует туннельному расщеплению таммовских уровней, исходяно существующих на свободных поверхностях. Решения типа  $\Delta_4$  представляют собой пример собственно интерфейсных состояний, возникающих в отсутствие таммовских уровней в полуограниченных кристаллах (отсутствие нулей функции  $F_-(E)$ ). Такие состояния появляются только, если  $t^S$  превышает некоторую критическую величину. Например, условие возникновения уровня вблизи края валентной зоны имеет вид

$$(t_-^S)^2 > t_-^r t_-^l F_-(E_-^{max}).$$

В этом случае интерфейс играет роль возмущающего потенциала, локализирующего носители заряда. Локализованные состояния возникают при конечной величине этого одномерного потенциала в силу асимметрии правого и левого кристаллов. Условие возникновения интерфейсных состояний существенно упрощается если поверхностный интеграл перескока совпадает с объемным в правом или левом полупространствах. Пусть, например,  $T_S = T_r$ . Тогда локализованные решения типа  $\Delta_3$  или  $\Delta_4$  возникают, если

$$\beta^{\pm 1} - \sqrt{\beta^{\pm 1} \frac{V(\Delta E_p^r - V)}{t_{\pm}^r t_{\mp}^r}} > 1, \quad \beta = \frac{t_+^r t_-^l}{t_-^r t_+^l},$$

где  $V$  – разрыв валентной зоны, а  $\Delta E_p^r$  – расстояние между связывающим и антисвязывающим  $p$ -уровнями в  $\Gamma$ -точке. Последняя формула явно демонстрирует влияние асимметрии потенциального рельефа на возможность появления локализованных состояний. В частности, если разрыв валентной зоны равен нулю, то интерфейсные решения того или иного типа возникают при произвольной величине параметра  $\beta \neq 1$ .

**3.** Полученные в настоящей работе результаты показывают, что полупроводниковый гетеропереход представляет собой сильное возмущение, которое может приводить к образованию локализованных состояний с энергией внутри запрещенной зоны. Спектр интерфейсных состояний в плоскости гетероперехода имеет зонный характер и в этом отношении новые интерфейсные состояния аналогичны поверхностным таммовским состояниям. Однако возможны случаи, когда интерфейсные

состояния возникают, даже если материалы, образующие гетеропереход, не имеют собственных поверхностных таммовских состояний. На эксперименте новые состояния будут проявлять себя в особенностях туннельно-резонансных вольт-амперных характеристик и кинетики генерационно-рекомбинационных процессов. Как отмечалось в работе [3], существование интерфейсных состояний донорного типа может объяснить необычное сочетание высокой подвижности и высокой концентрации электронов в квантовых ямах в нелегированных гетероструктурах InAs/AlSb. Заметим, что численное решение уравнения (11) для системы InAs/AlSb (значения параметров сильной связи были взяты из [8]) показывает, что интерфейсные состояния действительно возникают в широком интервале разумных значений интерфейсных интегралов перескока.

Результаты работы получены в наиболее общем виде в приближении сильной связи, учитывающем возмущения, локализованные на масштабе элементарной ячейки. Было показано, что гамильтониан, описывающий состояния вырожденной валентной зоны кубических полупроводников, сводится к гамильтониану пайерлсовской цепочки. Хорошо известно, что в случае слабого удвоения такая система адекватно описывается в рамках метода огибающих с использованием двухзонного гамильтониана типа Дирака. Физически очевидно, что полученные в настоящей работе результаты должны воспроизводиться и при таком подходе. Центр тяжести проблемы в этом случае переносится на корректное определение граничных условий. Обобщение методов описания интерфейсных состояний на непрерывный предел и задача микроскопического вывода граничных условий для огибающих функций будут рассмотрены в отдельной работе.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований и МНТП ФТНС.

- 
1. I.Tamm, Phys. Zs. Sowjetunion **1**, 733 (1932).
  2. H.M.James, Phys. Rev. **76**, 1611 (1949).
  3. H.Kroemer, C.Nguen, and B.Brar, J.Vac. Sci. Tech. В **10**, 1769 (1992).
  4. Р.А.Сурис, ФТП **20**, 2008 (1986).
  5. О.Э.Райчев, ФТП **23**, 1226 (1989).
  6. Б.А.Волков, О.А.Панкратов, Письма в ЖЭТФ **42**, 145 (1985).
  7. Q-G.Zhu and H.Kroemer, Phys. Rev. B **27**, 3519 (1983).
  8. P.Vogl, H.P.Hjalmarson, and J.D.Dow, Phys. Chem. Solids **44**, 365 (1983).