

Расчет иерархической сверхрешетки PbS–C в полиямной модели

© Е.Я. Глушко, В.Н. Евтеев

Государственный педагогический институт,
324086 Кривой Рог, Россия

(Получена 7 августа 1995 г. Принята к печати 25 октября 1996 г.)

Предложена полиямная модель иерархических полупроводниковых структур, отвечающая требованиям устойчивости спектра и ортогональности волновых функций состояний. Рассчитаны дисперсия энергии, плотность состояний, волновые функции и спектр "почти фибоначиевой" полупроводниковой системы. Сформулировано классификационное правило, связывающее структуру спектра со структурой системы. Обсуждаются оптические проявления иерархического устройства спектра.

Экспериментальные исследования иерархических структур (ИС) на основе полупроводниковых материалов обнаруживают ряд интересных электрофизических и оптических свойств, которые могут быть использованы в прикладных целях [1–3]. Прежде всего речь может идти о конструировании материалов с заданной электронной структурой и оптическими характеристиками.

Теоретические исследования электронной структуры ИС представлены в литературе в основном двумя направлениями. Первое базируется на представлении об эффективной (свободной) зонной частице, движущейся в макроскопическом огибающем потенциале сверхрешетки (СР) [4–7]. В таком подходе каждый из слоев описывается одной плоской потенциальной ямой, а спектр непосредственно выводится из коэффициента пропускания структуры [6,7]. Другое направление основано на идее модельного гамильтониана системы одноуровневых квантовых ям с чередующимися согласно иерархии "сильной" и "слабой" вероятностями перескока частицы в соседнюю яму [8,9]. Благодаря приближению ближайших соседей матрица гамильтониана становится трехдиагональной, что существенно упрощает проведение ренормгруппового анализа структуры спектра.

Полиямная модель

Однако возможна еще одна физическая постановка задачи об электронном спектре ИС, которая, по-видимому, в наибольшей степени отвечает оптическим экспериментам. В предлагаемой модели [10,11] атомам или элементарным ячейкам отвечают в поперечном к слоям ИС направлении квантовые ямы (КЯ) так, что каждый слой ИС описывается системой КЯ, а ИС представляет собой систему СР. Полиямный подход ликвидирует серьезный недостаток моноямного приближения (КЯ — полупроводниковый слой) — неустойчивость энергетического спектра. Например, увеличение толщины слоя вдвое в моноямной модели приводит к значительным изменениям минизонной картины, тогда как реальный спектр весьма слабо изменяется уже для $N \geq 10$, где N — число элементарных ячеек в поперечном направлении.

Другой аспект полиямной модели заключается в явном учете разделения продольного и поперечного движения электрона в материале. Размерное квантование определяется поперечным движением, а такие характеристики, как энергия электронного сродства U_1 и работа выхода U_0 суть результаты решения полной задачи. Поэтому в приближении для кристаллического потенциала, развитом в работе [12], одномерное движение поперек слоев характеризуется электронным сродством и работой выхода втрое меньшими объемами. Область применения приближения [12] обсуждалась в работе [13] на примере линейных цепочек цилиндрических потенциальных ям, где показана его асимптотическая точность для зонных состояний.

С учетом вышесказанного для расчета фибоначиевой структуры слоев PbS–C [3] мы аппроксимировали трехмерный потенциал объемного кристалла PbS суммой трех одномерных потенциалов Кронига–Пенни. Потенциал внешней среды (вакуума) принимался за нуль, а дно трехмерной ямы совпадало с потолком валентной зоны, который оценивался по работе выхода электрона из материала $U_0 = 4.6$ эВ. Тогда для глубины одномерной ямы имеем $U'_0 = 1.53$ эВ. При постоянном размере элементарной ячейки (яма плюс барьер) $a = 5.94 \text{ \AA}$, высота барьера U и отношение ширины барьера b к ширине ямы a варьировались таким образом, чтобы получить необходимую энергетическую щель, равную $\frac{\Delta}{3}$, где $\Delta = U_0 - U_1$, $U_1 = 4.2$ эВ. После подгонки были получены следующие параметры: ширина ямы 5.4 \AA , ширина барьера 0.54 \AA , $U = U'_0$ (рис. 1, a). Одномерные характеристики спектра PbS приведены на рис. 1, b (плавная линия). Углеродная пленка аппроксимировалась прямоугольным барьером шириной в 5 \AA и высотой, также равной глубине ямы. Затем была построена структура, описанная в статье [3]. Эту структуру можно записать формулой $VACAACACACAACACAACACACV^1$, где V — вакуумный барьер, A — слой PbS из десяти элементарных ячеек, C — пленка монослоя углерода (рис. 1, a).

¹ Следует отметить, что рекуррентное соотношение Фибоначчи здесь и в [3] не выполнено.

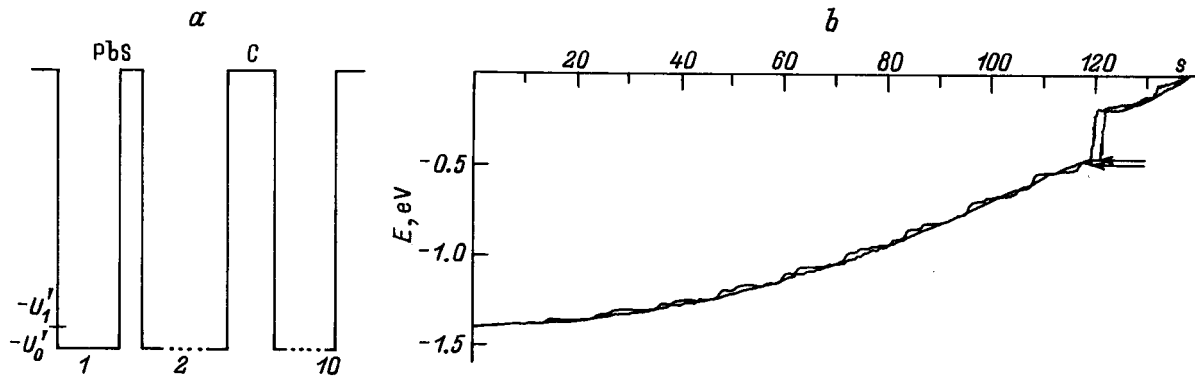


Рис. 1. Полиямная модель ИС PbS–C. *a* — геометрия одномерного потенциала ИС. Общее число ям 120, углеродных барьеров 9, пунктиром отмечены продолжения структуры, *b* — рассчитанная дисперсия энергии. *s* — нумерует состояния ($s_{\max} = 138$). Плавная кривая — толстый слой PbS (120 элементарных ячеек). Пульсирующая кривая — структура, описанная в [3].

Дисперсионное уравнение задачи на собственные значения, согласно [10,11], имеет вид

$$(1, k_0) \left[\begin{pmatrix} \bar{\mu}\bar{\nu} \\ \bar{\lambda}\bar{\mu} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu\nu \\ \lambda\mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{\mu}\bar{\nu} \\ \bar{\lambda}\bar{\mu} \end{pmatrix} \right]^{10} \begin{pmatrix} \mu'\nu' \\ \lambda'\mu' \end{pmatrix} \dots \dots \begin{pmatrix} \mu'\nu' \\ \lambda'\mu' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 \\ -k_0 \end{pmatrix} = 0, \quad (1)$$

где $k = \sqrt{\frac{2m(U_0 - E)}{\hbar^2}}$, $k_0 = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}$,

$$\begin{aligned} \mu &= -k \cos ka, & \lambda &= \sin ka, & \nu &= k^2 \sin ka, \\ \bar{\mu} &= -k_0 \operatorname{ch} k_0 \frac{b}{2}, & \bar{\lambda} &= \operatorname{sh} k_0 \frac{b}{2}, & \bar{\nu} &= k_0^2 \operatorname{sh} k_0 \frac{b}{2}, \\ \mu' &= -k_0 \operatorname{ch} k_0 b', & \lambda' &= \operatorname{sh} k_0 b', & \nu' &= k_0^2 \operatorname{sh} k_0 b'. \end{aligned} \quad (2)$$

Матрица со штрихованными элементами отвечает углеродному барьеру толщиной b' , а тройка квадратных матриц в основании степени — последовательности полубарьер–яма–полубарьер кристаллического потенциала PbS. Степень в (1) соответствует 10-ячному слою A в формуле структуры. Оконечные матрицы — строка и столбец — обеспечивают выполнение граничных условий на внешних поверхностях ИС. Расчет описанной полямной модели иерархической структуры PbS–C — энергетического спектра, волновых функций и плотности состояний — проводился с использованием осцилляционной теоремы, что давало возможность поддерживать относительную погрешность в определении волновых функций (ВФ) не более 10^{-8} и гарантировать их ортогональность. Интересная особенность расчета электронной структуры CP и ИС заключается в огромной разнице для необходимых точностей энергии состояний и соответствующих ВФ. С тем, чтобы последние удовлетворяли требованиям непрерывности, ортогональности по отношению к остальным ВФ и содержали правильное число узлов, точность расчета приходилось увеличивать на несколько порядков. Активный компьютерный интерфейс

модели позволяет по рекуррентным формулам создавать и просчитывать различные ИС, а также неупорядоченные системы.

Результаты расчета и обсуждение

Результаты расчета ИС, содержащей в целом 120 ячеек PbS и 9 слоев углерода, представлены на рис. 1, *b*. Легко видеть, что размерное квантование поперечного движения в полямной модели приводит к перегруппировке состояний внутри зоны PbS. Сужение одномерной зоны проводимости структуры на ≈ 0.03 эВ в сравнении с зоной PbS (стрелки на рис. 1, *b*) есть следствие недостаточной толщины слоев PbS в ИС. Детальный количественный анализ показывает, что этот эффект (см. также [11]) представляет собой одно из проявлений феномена устойчивости спектра многопериодических систем КЯ. Уровни углерода отсутствуют в спектре, так как углерод представлен простым барьером.

В зоне проводимости уровни перегруппировались в подзоны, при этом максимальный зазор между подзонами оказался равным 0.072 эВ. Такое изменение спектра по сравнению со спектром чистого PbS, на наш взгляд, едва ли можно будет заметить неселективными методами, учитывая также то, что при комбинации уровней для трех измерений вторая запрещенная зона исчезнет. Если же в процессах рассеяния или поглощения света участвуют лишь поперечные квантовые числа задачи (здесь s), то вертикальным участкам кривой дисперсии (рис. 1, *b*) отвечают горизонтальные полочки на кривой поглощения, что, по всей вероятности, наблюдалось в экспериментальной работе [3]. Визуальный просмотр волновых функций состояний показал, что они имеют вид стоячих волн и локализованы то в областях с двойным, то в областях с одинарным слоем PbS. Классификационный анализ структуры спектра (рис. 2) обнаруживает четкую взаимосвязь между числом субполос младшей иерархии в полосе старшей иерархии и таким образом факторами,

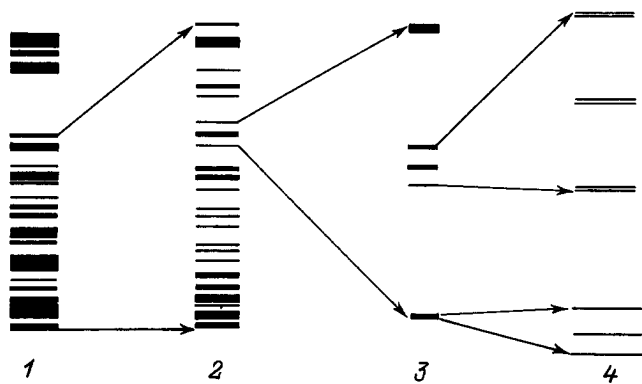


Рис. 2. Энергетическая схема ИС PbS–C. В колонках 1–4 приведена структура спектра по убыванию иерархии; стрелки ограничивают спектральный участок и показывают степень увеличения масштаба.

как число одинарных и двойных слоев PbS. Результаты исследований состояний в ВФ данной ИС, а также многих других приводит к простому классификационному правилу: чем более внешний (или старшей) является иерархия потенциала, тем в более внутренней структурной иерархии уровней она отражена и наоборот. Так, две полосы самой старшей иерархии (колонка 1) обусловлены параметрами одинарной потенциальной ямы (рис. 1 а), а шесть полос самой младшей иерархии (колонка 4) определяются шестью макрослоями с одинарным слоем А. Мельчайшей единицей структуры является одиночная яма PbS, и это приводит к разбиению спектра на зоны, каждая из которых насчитывает по 120 уровней (рис. 2, колонка 1). Верхняя зона неполностью заполнена. Следующей единицей, определяющей иерархию, является слой из десяти ям PbS, поэтому каждая зона разбивается на 10 полос по 12 уровней в каждой (рис. 2, колонка 2). За образование следующего уровня иерархии спектра отвечают одновременно одинарные и двойные слои PbS. Каждая полоса в свою очередь разбивается на три подгруппы. Верхняя и нижняя подгруппы насчитывают по три уровня, а средняя — 6 уровней (рис. 2, колонка 3). Такое разбиение объясняется тем, что в структуре имеется три двойных слоя (каждый из которых поставляет в спектр по два уровня на полосу) и шесть одинарных слоев. Подобная трактовка разбиения подтверждается еще и тем, что ВФ средней подгруппы локализованы в одинарных слоях, а ВФ верхней и нижней групп — в двойных слоях PbS.

Расчет плотности состояний $\rho_s = |E_s - E_{s-1}|^{-1}$ по полученной дисперсионной зависимости для ИС показал крайне высокую степень неоднородности этой величины. Сильная неоднородность сохраняется даже в логарифмической шкале (для $\ln \rho_s$).

Помещение системы ям (рис. 1, а) в электрическое поле разрушало стройную иерархию спектра. Эрозия младших иерархических ступеней спектра (колонка 4) начиналась уже для напряжений $\Delta\varphi \approx 0.01$ В. При

$\Delta\varphi \approx 0.3$ В поле полностью перемешивает приведенную на рис. 2 структуру, не изменяя резко выраженной неоднородности плотности состояний. При $\Delta\varphi \approx 0.4$ В исчезает щель между полосами старшей иерархии.

Заключение

Полученные здесь общие выводы относительно электронной структуры остаются в силе и для чистых фибоначиевых структур, а также для произвольных ИС. В качестве примера последних можно взять ИС, в которой десять элементарных КЯ десятикратно умножаются, перемежаясь внутренними прослойками, а полученная структура еще раз десятикратно умножается через более толстую прослойку и так далее. Процесс обрывается на самой старшей иерархической ступени. Поляимная модель дает четкую десятичную иерархию спектра этой структуры. В частности, увеличение толщины самых внешних прослоек приводит к "слипанию" уровней в субполосах тонкой структуры, а толщина внутренних прослоек управляет полосами самого старшего уровня иерархии спектра.

Модель позволяет более точное моделирование одномерного кристаллического потенциала исходных материалов за счет детализации (ступеньками) формы элементарной потенциальной ямы. Ее можно делать сколь угодно сложной, при этом растет число матриц в квадратной скобке формулы (1).

Группировка состояний в ИС приводит к появлению почти вертикальных участков дисперсионной кривой, что может быть причиной (наряду с интерференционными эффектами) появления горизонтальных полочек в спектре поглощения ИС, несмотря на интегральную природу коэффициента поглощения.

Список литературы

- [1] Proc. VIII Int. Conf. on electronic properties of two-dimensional systems Surf. Sci., **229**, N 1–3 (1990).
- [2] П.С. Копьев, И.И. Решина. ФТП, **23**, 1316 (1989).
- [3] С.Ф. Мусихин, Л.Г. Бакуева, В.И. Ильин, О.В. Рабизо, Л.В. Шаронова. ФТП, **29**, 474 (1995).
- [4] B. Sutterland, M. Kohmoto. Phys. Rev. B, **36**, 5877 (1987).
- [5] L.J. Sham, Y.T. Lu. J. Luminescence, **44**, 207 (1989).
- [6] Ю.В. Кобаев, С.Н. Молотков. Письма ЖЭТФ, **59**, 770 (1994).
- [7] А.Н. Король. УФЖ, **40**, 749 (1995).
- [8] Q. Niu, F. Nori. Phys. Rev. B, **42**, 10 329 (1990).
- [9] S.D. Gupta, D.S. Ray. Phys. Rev. B, **38**, 3628 (1988).
- [10] Е.Я. Глушко. ФТТ, **38**, 323 (1996); ФТТ, **38**, 2021 (1996).
- [11] Е.Я. Глушко, В.Н. Евтеев. УФЖ, **40**, 719 (1995); Препринт КрГПИ (Кривой Рог, 1994) с. 56.
- [12] В.Г. Барьяхтар, Е.Д. Белоколот, А.Н. Коростиль. Металлофизика, **13**, № 5, 3 (1991); Е.Д. Белоколот, А.Н. Коростиль. Металлофизика, **13**, № 6, 3 (1991).
- [13] Е.Я. Глушко. ФНТ, **22**, № 10 (1996).

Редактор В.В. Чалдышев

Calculations of hierarhical superlattice PbS–C in the multi–well model

E.Ya. Glushko and V.N. Evteev

Krivoy Rog Pedagogical Institute,
324086 Krivoy Rog, Russia

Abstract The multi-well model of hierarchical semiconductor structure is proposed. The model satisfies the demand of spectrum stability as well as that of the wave function orthogonality. The energy dispersion, wave functions, density of states and spectrum structure of a real quasi-Fibonacci PbS–C superlattice are calculated. A simple classification rule for spectrum caused by the system hierarchy is formulated. Some optical consequences of the spectrum hierarchical structure are discussed.

E-mail: eyagl@kpi.dp.ua (Глушко)