

05;07;11;12

## О поверхностных состояниях окислов бария и магния

© А.П. Савинцев,<sup>1</sup> А.И. Темроков<sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Кабардино-Балкарский государственный университет,  
360004 Нальчик, Россия  
e-mail: savinal@mail.ru

<sup>2</sup> Научно-исследовательский институт прикладной математики и автоматизации РАН,  
360000 Нальчик, Россия

(Поступило в Редакцию 18 мая 2001 г.)

Данные по спектроскопии кристаллов окиси магния и бария сравнивались с расчетами сужения запрещенной зоны за счет таммовских состояний для грани (100) этих соединений.

Граница твердого тела с вакуумом или другой средой может служить источником ряда особых энергетических состояний — поверхностных состояний. Если поверхностное возмущение достаточно велико, вблизи поверхности кристалла могут появиться такие связанные поверхностные состояния, как таммовские состояния [1]. В ряде случаев поверхностные состояния сливаются в поверхностные энергетические зоны. Распределение поверхностных состояний по энергиям чаще всего трудно однозначно установить, однако принято считать, что в ионных и частично ионных кристаллах существуют зоны поверхностных состояний акцепторного типа ниже зоны проводимости и зоны состояний донорного типа выше валентной зоны. Предполагается, что зоны поверхностных состояний таких кристаллов сливаются с валентной зоной и зоной проводимости (рис. 1). Таким образом, наличие поверхностных (таммовских) состояний может влиять на ширину запрещенной зоны на поверхности кристаллических диэлектриков. В нашей работе сравнивались теоретические расчеты влияния поверхностных (таммовских) состояний на зонную структуру и данные по спектрометрии кристаллов ВаО и MgO. Соединения ВаО и MgO со структурой каменной соли довольно слабо изучены с точки зрения их поверхностных свойств [1,2].

Расчет возможного сужения запрещенной зоны на поверхности диэлектрика за счет таммовских состояний ( $\Delta E$ ) рассматривался в данной работе для грани (100) этих кристаллов. Согласно рис. 1,  $\Delta E = E_c + E_2 - E_v - E_1$ . Квантово-механический расчет сужения запрещенной зоны дает для грани (100) ВаО  $\Delta E = 0.6$  eV [3].

В квазиклассическом приближении использовалась формула связи сужения запрещенной зоны за счет поверхностных состояний с удельной поверхностной энергией грани ( $\sigma$ ) [3,4]:

$$\Delta E = 4\sigma/n,$$

где  $n$  — число частиц на единице площади грани.

Если взять для грани (100) MgO  $\sigma = 957$  мДж/м<sup>2</sup>, а постоянную решетки равной 0.43 нм [5], то для грани (100) MgO  $\Delta E = 1.11$  eV.

Расчетные результаты сравнивались с данными по УФ спектроскопии соединений ВаО и MgO [2]. Монокри-

сталлы ВаО имели толщину 0.38 мм, а MgO — 1.2 мм. Рассмотренные окислы кристаллизуются в решетки типа каменной соли, имеющей плоскость спайности (100), которая обладает наименьшим значением  $\sigma$  [2,6].

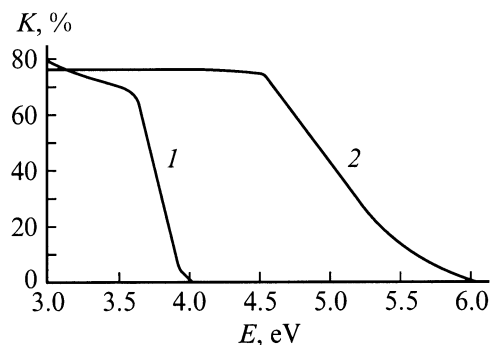
Как видно из рис. 2, энергия края области прозрачности кристаллов ВаО и MgO не совпадает с энергией края собственного (объемного) поглощения  $E_a$  этих соединений. Энергия края объемного поглощения  $E_c - E_v$  равна для ВаО  $4.0 \pm 0.2$  eV, а для MgO — 6 eV [2]. Энергия края области прозрачности  $E_1 - E_2$  составляет для ВаО  $3.50 \pm 0.05$  eV, а для MgO —  $4.55 \pm 0.10$  eV. Исходя из этих данных, можно получить, что значение

$$\Delta E = E_c + E_2 - E_v - E_1 = E_a - E_t$$

для ВаО равно  $0.5 \pm 0.2$  eV, а для MgO —  $1.45 \pm 0.10$  eV.



**Рис. 1.** Зоны поверхностных состояний ионного типа [1]:  $E_c$  — край зоны проводимости,  $E_v$  — край валентной зоны,  $E_1$  — край зоны поверхностных состояний акцепторного типа;  $E_2$  — край зоны поверхностных состояний донорного типа.



**Рис. 2.** Изменение прозрачности монокристалла ВаО (1) и MgO (2) в зависимости от энергии фотона.

По результатам данной работы мы считаем что 1) разность энергий края объемного поглощения и края области прозрачности позволяет оценить сужение запрещенной зоны за счет поверхностных состояний, 2) для окислов бария и магния теоретические расчеты сужения запрещенной зоны за счет поверхностных состояний для грани (100) неплохо согласуются с данными по измерению прозрачности этих монокристаллов в зависимости от энергии фотона.

## Список литературы

- [1] Дэвидсон С., Левин Дж. Поверхностные (таммовские) состояния. М.: Мир, 1973. 232 с.
- [2] Воробьев А.А. Физические свойства ионных кристаллических диэлектриков. Кн. 1. Томск: Изд-во Томского ун-та, 1960. 231 с.
- [3] Таова Т.М., Темроков А.И., Кишуков А.Ю. // Воздействие мощных потоков энергии на вещество. М.: Изд-во ИВТАН, 1992. С. 66–77.
- [4] Савинцев А.П., Темроков А.И. // Тез. докл. 15 Междунар. конф. "Уравнения состояния вещества". Эльбрус, 2000. С. 25–27.
- [5] Темроков А.И. Автореф. докт. дис. Л.: ЛГУ, 1982. 31 с.
- [6] Кузнецов В.Д. Поверхностная энергия твердых тел. М.: ГИТТЛ, 1954. 220 с.