

©1995

## ПРИМЕСЬ АНДЕРСОНА В СИММЕТРИЧНОМ ИНВЕРСНОМ ПОЛУПРОВОДНИКОВОМ ГЕТЕРОКОНТАКТЕ

*В.Г.Канцер, Н.М.Малкова*

Международная лаборатория высокотемпературной сверхпроводимости и твердотельной электроники Академии наук Молдавии,  
277028, Кишинева, Молдавия  
(Поступила в Редакцию 27 июля 1994 г.  
В окончательной редакции 31 марта 1995 г.)

Предложено обобщение модели Андерсона для примеси в симметричном инверсном гетероконтакте, рассматриваемом в рамках эффективной модели Дирака. Показано, что благодаря взаимодействию с состояниями гетероперехода андерсоновская примесь вне зависимости от положения ее затравочного уровня формирует внутри запрещенной зоны исходных полупроводников уровень, энергетическое положение которого зависит от положения атома примеси относительно плоскости интерфейса.

Важнейшим разделом современной физики полупроводников является исследование квантовых полупроводниковых структур: гетероконтактов, квантовых ям, сверхрешеток [1]. Выделенность этих объектов связана с существованием в них низкоразмерных электронных состояний, появление которых обусловлено в первую очередь эффектами размерного квантования. Наряду с этим в последние годы была выявлена другая возможность формирования низкотемпературных электронных состояний в квантовых структурах, связанная с возникновением приграничных состояний, локализованных у границы раздела полупроводникового гетероконтакта [2-4]. Будучи сформированными из нарастающих объемных электронных волн, эти состояния могут быть получены методом шивки и в рамках однозонного метода эффективной массы при условии смены знака кривизны зоны у гетероконтакта. Такие гетероконтакты были названы инверсными [4]. В них интерфейсные состояния возникают независимо от вида переходного слоя между полупроводниками. Конкретными примерами таких контактов являются гетеропереходы на базе узкощелочных полупроводников типа II-VI (HgTe/CdTe) или IV-VI (PbTe/SnTe). Эти структуры сформированы из одного полупроводника с положительной щелью (CdTe или PbTe) и второго с отрицательным энергетическим зазором (HgTe или SnTe).

Являясь по своей природе тамбовскими, приграничные состояния инверсного контакта имеют двумерные энергетические ветви, расположенные в области запрещенных зон исходных полупроводников [5]. В простейшем случае двухзонной модели инверсного контакта [4] внутри запрещенной зоны возникает невырожденное состояние, локализованное вблизи границы раздела и обладающее линейным спектром вдоль плоскости контакта (вейлевская ветвь). При достаточно широком переходе слое наряду с вейлевской ветвью имеется набор двукратно вырожденных состояний с конечной массой. Наличие зоны тяжелых дырок в структурах на базе  $\text{HgTe}/\text{CdTe}$  не влияет на основные характеристики приграничных состояний, хотя последние имеют ряд свойств, отличных от случая гетероконтакта на базе полупроводников IV-VI. Отметим, что интерфейсные состояния могут возникать также и в гетероконтакте без инверсии зон [6,7]. В этом случае они появляются лишь при конечных влечинах волнового вектора вдоль слоя, и их энергии располагаются на фоне разрешенных объемных зон исходных полупроводников [7].

Наиболее приемлемыми полупроводниковыми объектами для реализации низкоразмерных систем интерфейсного типа с энергиями в окрестности краев зон являются структуры на базе узкощелевых полупроводников IV-VI или II-VI. Как показывает недавнее теоретическое рассмотрение [8], интерфейсные состояния могут возникать и в гетероконтактах на основе полупроводников III-V. Однако важнейшей особенностью реальных узкощелевых полупроводников как группы IV-VI, так и II-VI является большая концентрация свободных носителей, связанная с отклонением от стехиометрии в процессе получения. При этом огромные значения диэлектрической проницаемости и малые значения эффективных масс в полупроводниках IV-VI, а в полупроводниках типа  $\text{HgTe}$  отсутствие щелей в спектре обуславливают фактическое отсутствие мелких (водородоподобных) примесных уровней. В результате этого носители в этих материалах не вымораживаются даже при самых низких температурах.

Управлять концентрацией носителей в узкощелевых полупроводниках позволяют собственные дефекты и примеси. При этом из-за малых щелей в спектре энергетические уровни многих из них могут лежать вне области запрещенных энергий, т.е. располагаются на фоне разрешенных зон. Энергетические уровни таких примесей и дефектов оказываются резонансными [9,10]. Как известно, адекватной моделью примесных состояний резонансного типа является модель Андерсона [11]. Целью настоящей работы является обобщение модели Андерсона для анализа примеси с глубоким уровнем в полупроводниковом гетероконтакте с инверсией зон. При этом будем ограничиваться случаем симметричного гетероконтакта из полупроводников типа IV-VI с зеркальными зонами и равными по абсолютному значению щелями в спектре  $E_{ga} = E_{gb}$  (где  $E_{ga}, E_{gb}$  — ширины запрещенных зон исходных полупроводников). Для симметричного инверсного контакта разность работ выхода полупроводников, формирующих гетероконтакт, равняется нулю.

Как отмечалось выше, важной особенностью чистого инверсного контакта без примеси является возникновение интерфейсных состояний, пространственно локализованных у границы раздела полупроводников. При этом такие состояния генерированы зонными состояниями исходных полупроводников. Поэтому, учитывая сильную гибридизацию зонных и примесных состояний в модели Андерсона, следует

ожидать сильного взаимного влияния примесных и интерфейсных состояний в полупроводниковом гетеконтакте. В соответствии с этим развитие в настоящей работе модели Андерсона для инверсного гетероконтакта ставит перед собой задачу исследования энергетического спектра квазилокальных примесей в полупроводниковом гетероконтакте под воздействием приграничных электронных состояний.

## 1. Гамильтониан задачи

Полный гамильтониан системы

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{imp}} \quad (1)$$

включает гамильтониан гетероструктуры  $H_0$  и примесный гамильтониан Андерсона  $\hat{H}_{\text{imp}}$ .

Рассмотрение задачи в нашей работе ведется в рамках  $kp$ -схемы, хорошо обоснованной для узкозонных полупроводников IV–VI. В двухзонном приближении спектр полупроводниковой гетероструктуры описывается эффективным гамильтонианом Дирака с зависящей от координат шириной запрещенной зоны [12]

$$\hat{H}_0 = \int \psi^\dagger(\mathbf{r}) \left( \gamma^0 \gamma \hat{p} + \gamma^0 \Delta(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r}) \right) \psi(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (2)$$

где оператор поля частиц  $\psi(\mathbf{r})$  в силу симметричных свойств полупроводников IV–VI является биспинором, относящимся к двум ближайшим термам  $L_1$  и  $L_2$ , формирующим запрещенную зону исходных полупроводников;  $\gamma^0, \gamma = (\gamma^1, \gamma^2, \gamma^3)$  — матрицы Дирака;  $\hat{p} = -i\hbar(v_x \nabla_x, v_y \nabla_y, v_z \nabla_z)$  — оператор импульса;  $v_x, v_y, v_z$  — компоненты фермиевской скорости;  $2\Delta(\mathbf{r}) = E_g(\mathbf{r})$ ;  $V(\mathbf{r})$  — потенциал, описывающий изменение работ выхода гетероперехода. Для упрощения аналитических выкладок в этой работе будем рассматривать однодлинный симметричный случай, когда  $v_x = v_y = v_z = v$ . Заметим, что учет анизотропии поверхности Ферми не вызывает трудностей принципиального характера.

Второе слагаемое в (1) описывает андерсоновскую примесь с одним уровнем  $E_d$ , локализованную в  $l$ -ом узле решетки, при этом мы не учитываем кулоновского взаимодействия на примеси. В представлении вторичного квантования  $\hat{H}_{\text{imp}}$  записывается в виде

$$\hat{H}_{\text{imp}} = E_d \sum_s d_s^\dagger d_s + \sum_{i,s} (V_{is} a_i^\dagger d_s + V_{is}^+ d_s^\dagger a_i), \quad (3)$$

где  $d_s^\dagger, d_s$  — операторы рождения и уничтожения локализованного на примеси электрона в узле  $\mathbf{R}_l = a(l_1, l_2, l_3)$  ( $a$  — половина периода ГЦК-решетки исходных полупроводников) со спином  $s$ ,  $E_d$  — атомный уровень примеси,  $a_i^\dagger, a_i$  — операторы рождения и уничтожения электрона в состоянии, определяемом набором квантовых чисел  $i$ ,  $V_{is}$  — матричный элемент взаимодействия между примесными и зонными состояниями полупроводников, формирующих гетероструктуру. Параметры  $a$  и  $E_d$  примесного гамильтониана предполагаются одинаковыми для обоих полупроводников.

Мы будем рассматривать одномерный гетеропереход, ось которого (вдоль  $C_3$  исходных полупроводников) параллельна  $z$ . Тогда оси  $x$  и  $y$  лежат в плоскости гетероперехода. В этом случае  $\Delta(\mathbf{r}) = \Delta(z)$ . Таким образом, учитывая геометрию задачи, можно выбрать функцию  $\psi$  в виде

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi(z)e^{i\mathbf{k}_\perp \mathbf{r}}, \quad (4)$$

где  $\mathbf{k}_\perp = (k_x, k_y, 0)$ , а  $\psi(z)$  — огибающая волновой функции. Кроме этого, как уже отмечалось, мы рассматриваем симметричный гетеропереход, в котором середины запрещенных зон исходных полупроводников совпадают, поэтому в (2)  $V(\mathbf{r}) = 0$ . Итак, вместо (2) имеем

$$\hat{H}_0 = \int \psi^\dagger(z) \left( \gamma^0 \gamma^3 \hat{p}_z + \hbar v \gamma^0 (\gamma \mathbf{k}_\perp) + \gamma^0 \Delta(z) \right) \psi(z) dz. \quad (5)$$

Воспользовавшись результатами работы [12], находим, что собственные волновые функции уравнения  $\hat{H}_0 \psi = E \psi$  в представлении, в котором

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma = \begin{pmatrix} i\sigma & 0 \\ 0 & -i\sigma \end{pmatrix}, \quad \alpha = \gamma^0 \gamma = \begin{pmatrix} 0 & \sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix}, \quad (6)$$

где  $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ ,  $\sigma_{x,y,z}$  — матрицы Паули, имеют вид

$$\psi_\lambda(z) = \frac{1}{A_\lambda} \begin{pmatrix} 1 \\ i\lambda e^{i\theta} \frac{\partial_z + k(z)}{\varepsilon + \lambda k_\perp} \\ -i \frac{\partial_z + k(z)}{\varepsilon + \lambda k_\perp} \\ \lambda e^{i\theta} \end{pmatrix} \varphi(z). \quad (7)$$

Функция  $\psi_\lambda(z)$  является собственной функцией оператора псевдочетности  $\hat{p} = i\gamma^0 \gamma^3 (\gamma \mathbf{k}_\perp) / k_\perp$  собственные значения которого  $\lambda = \pm 1$ . В (7) введены следующие обозначения:  $\partial_z = \partial/\partial z$ ,  $\varepsilon = E/\hbar v$ ,  $k(z) = \Delta(z)/\hbar v$ ,  $\exp(\pm i\theta) = (k_x + ik_y)/k_\perp$ ,  $k_\perp = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}$ ,  $A_\lambda$  — нормирующий множитель. Функция  $\varphi(z)$  удовлетворяет следующему дифференциальному уравнению:

$$\left\{ [\partial_z - k(z)][\partial_z + k(z)] + \varepsilon^2 - k_\perp^2 \right\} \varphi(z) = 0. \quad (8)$$

В настоящей работе будем считать, что ширина запрещенной зоны инверсного контакта изменяется по закону

$$\Delta(z) = \Delta_0 \text{th}(z/L), \quad (9)$$

где  $L$  — определяет толщину переходного слоя, а  $2\Delta_0 = |E_{ga}| = |E_{gb}|$ . В этом случае решение уравнения (8) выражается через гипергеометрические функции. Так, для локализованных состояний, определяющих спектр квазидвумерных энергетических ветвей гетероструктуры, имеем

$$\varphi_k(z) = e^{ikz} F \left[ 1 + k_0 L, -k_0 L, 1 - ikL; \frac{1}{2} \left( 1 - \text{th} \left( \frac{z}{L} \right) \right) \right]. \quad (10)$$

Здесь  $k_0 = \Delta_0/\hbar v$ , и  $\varepsilon = \pm \sqrt{k_0^2 + k^2 + k_\perp^2}$  для любых  $k$ .

Локализированные вблизи границы раздела интерфейсные состояния описываются функцией

$$\varphi_p(z) = \operatorname{sech}^p\left(\frac{z}{L}\right) F\left[1 + p + k_0 L, p - k_0 L, p + 1; \frac{1}{2}\left(1 - \operatorname{th}\left(\frac{z}{L}\right)\right)\right], \quad (11)$$

причем  $\varepsilon = \pm\sqrt{k_0^2 + k_\perp^2 - \left(\frac{p}{L}\right)^2}$ . Из граничных условий следует, что спектр локализованных интерфейсных состояний дискретен, и параметр  $p$  определяется из условия

$$p = k_0 L - n, \quad (12)$$

причем целое число  $n$  изменяется в пределах

$$0 \leq n < Lk_0. \quad (13)$$

При  $n = 0$  получаем так называемую нулевую вейлевскую ветвь спектра [4] с линейным по  $k_\perp$  законом дисперсии.

Заметим, что каждое собственное значение  $E$  гамильтониана  $\hat{H}_0$  двукратно вырождено по параметру  $\lambda$ . Это является очевидным следствием двукратного крамерсова вырождения всех уровней энергии исходных полупроводников, обладающих центром инверсии, который сохраняется и в рассматриваемом инверсном контакте.

Итак, при учете зависимости волновой функции  $\psi_\lambda(z)$  (7) от параметров  $\lambda, k$  (или  $p$ ),  $k_\perp$  и знака  $\varepsilon$  оператор поля частиц записывается в виде разложения

$$\psi(r) = \frac{1}{\sqrt{L_1 L_2}} \sum_i \psi_i(z) e^{i\mathbf{k}_\perp \mathbf{T} a_i}, \quad (14)$$

где  $i$  — обозначает набор всех квантовых чисел, определяющих  $\psi_i(z)$ ;  $a_i$  — оператор уничтожения частицы в состоянии  $i$ ;  $L_1, L_2, L_3$  — размеры системы в направлении осей  $x, y, z$ .

Используя разложение (14), для  $\hat{H}_0$  и  $\hat{H}_{\text{imp}}$  получаем

$$\hat{H}_0 = \sum_i E_{i a_i^\dagger a_i}, \quad (15)$$

$$\hat{H}_{\text{imp}} = a^{3/2} V \sum_{i,s} [d_s^\dagger a_i \chi_i^+ \psi_i(\mathbf{R}_i) + \psi_i^\dagger(\mathbf{R}_i) \chi_i a_i^\dagger d_s] + E_d \sum_s d_s^\dagger d_s. \quad (16)$$

Здесь  $E_i$  — собственное значение гамильтониана  $\hat{H}_0$ , получаемое из решения уравнения (8). В  $\hat{H}_{\text{imp}}$ , используя симметричные свойства рассматриваемых полупроводников, матричный элемент  $V_{i,s}$  можно записать в виде

$$V_{i,s} = a^{3/2} V \chi_i^+ \psi_i(\mathbf{R}_i), \quad (17)$$

где в представлении (6) для матриц  $\gamma^i$

$$\chi_i^+ = \sqrt{2} \left( \cos \frac{\pi}{2} l, \cos \frac{\pi}{2} l, -i \sin \frac{\pi}{2} l, -\sin \frac{\pi}{2} l \right), \quad (18)$$

$l = l_1 + l_2 + l_3$ . Заметим, что в выбранном нами представлении верхние две компоненты вектора  $\psi_i$  описывают состояния зоны проводимости,

а нижние — состояния валентной зоны. Поэтому выделение вектора  $\chi_l$  в выражении для  $\hat{H}_{imp}$  (16) позволяет учесть требования симметрии для матричного элемента гибридизации  $V_{is}$ . В выражении (16) было использовано предположение о том, что матричные элементы взаимодействия между примесными состояниями и состояниями зоны проводимости и валентной зоны, а также локализованными интерфейсными состояниями одинаковые. Отказ от этого предположения приведет к появлению в задаче вместо одного параметра  $V$  нескольких параметров.

## 2. Решение задачи

Следуя методу, развитому в [13], определим функции Грина

$$\begin{aligned} G_d^s(\tau) &= -\langle T\tau d_s(\tau)d_s^\dagger(0) \rangle, \\ G_i(\tau) &= -\langle T\tau a_i(\tau)a_i^\dagger(0) \rangle, \\ G_{id}^s(\tau) &= -\langle T\tau a_i(\tau)d_s^\dagger(0) \rangle, \end{aligned} \quad (19)$$

где  $d_s(\tau) = e^{\hat{H}\tau}d_s e^{-\hat{H}\tau}$ ,  $\tilde{H} = H + \mu N_e$ ,  $\mu$  — химический потенциал,  $N_e$  — число электронов. В энергетическом представлении, используя метод уравнений движения, находим

$$(i\omega_n + \mu - E_d)G_d^s(\omega_n) = 1 - \sqrt{\frac{a^3}{L_1 L_2}} V \chi_l^\dagger \sum_i e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_l} \psi_i(\mathbf{R}_l) G_{id}^s(\omega_n), \quad (20)$$

$$(i\omega_n + \mu - E_i)G_{id}^s(\omega_n) = -\sqrt{\frac{a^3}{L_1 L_2}} V e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_l} \psi_i^\dagger(\mathbf{R}_l) \chi_l G_d^s(\omega_n). \quad (21)$$

Отсюда получаем

$$G_d^s(\omega_n) = \left[ i\omega_n + \mu - E_d - \frac{V^2 a^3}{L_1 L_2} \sum_i \chi_l^\dagger \frac{\Psi_i(\mathbf{R}_l) \Psi_i^\dagger(\mathbf{R}_l)}{i\omega_n + \mu - E_i} \chi_l \right]^{-1}. \quad (22)$$

Здесь сумма по  $i$  включает суммирование по всем квантовым числам, определяющим функцию  $\psi_i$ , т.е. по  $\mathbf{k}_\perp$ ,  $k$  для делокализованных состояний и по  $p$  для локализованных состояний, а также по состояниям с  $E_i > 0$  и  $E_i < 0$ .

Используя явный вид функции  $\psi_i(\mathbf{R}_l)$  (7), получаем выражение для суммы в (22)

$$\begin{aligned} \sum &\equiv \chi_l^\dagger \sum_i \frac{\psi_i(\mathbf{R}_l) \psi_i^\dagger(\mathbf{R}_l)}{\omega - E_i} \chi_l = \\ &= \sum_{\mathbf{k}_\perp, k(p)} \frac{2\omega}{\omega^2 - E_i^2} \left\{ \frac{1}{A_i^+} \left[ \varphi^2(z_l) + \left( \frac{\partial_z + k(z)}{\varepsilon_i + k_\perp} \varphi(z) \Big|_{z=z_l} \right)^2 \right] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{A_i^-} \left[ \varphi^2(z_l) + \left( \frac{\partial_z + k(z)}{\varepsilon_i - k_\perp} \varphi(z) \Big|_{z=z_l} \right)^2 \right] \right\}, \end{aligned} \quad (23)$$

где  $\omega = i\omega_n + \mu$ . Для нормированных множителей имеем

$$A_i^\pm = 2 \int_{-L_s/2}^{L_s/2} \left[ \varphi^2(z) + \left( \frac{\partial_z + k(z)}{\varepsilon_i \pm k_\perp} \varphi(z) \right)^2 \right] dz. \quad (24)$$

Рассмотрим частный случай  $k_0 L = 1$ ; тогда, как видно из (13), из интерфейсных состояний возникает только нулевая мода с  $n = 0$ . В этом случае можно провести весь расчет аналитически. Для суммы из (22) получаем

$$\begin{aligned} \frac{V^2 a^3}{L_1 L_2} \sum = & -\frac{V^2 a^3 \hbar v}{8\pi l^2} \int_0^\infty \frac{\omega \operatorname{sech}^2\left(\frac{z}{L}\right) dk_\perp^2}{(\hbar^2 v^2 k_\perp^2 - \omega^2) \sqrt{\Delta_0^2 + \hbar^2 v^2 k_\perp^2 - \omega^2}} + \\ & + 2\omega \frac{V^2 a^3}{(2\pi)^3} \int \frac{dk}{\omega^2 - \Delta_0^2 - \hbar^2 v^2 k^2}. \end{aligned} \quad (25)$$

Здесь мы рассматриваем только состояния, лежащие внутри запрещенной зоны структуры, т.е. предполагаем, что  $\Delta_0^2 - \omega^2 \geq 0$ .

Второе слагаемое в (25) при интегрировании по  $k$  расходится. Появление этой расходимости обусловлено аппроксимацией метода эффективной массы и является общей для подобного типа задач. Проблему вычисления расходящегося интеграла можно формально решить, введя дополнительный параметр  $K$ , ограничивающий область интегрирования по  $k$  и описывающий, по сути, конечную ширину зон.

Итак, после несложных вычислений получаем

$$\begin{aligned} G_d(\omega) = & \left\{ \omega - E_d - \frac{\omega \alpha \Delta_0}{8\pi} \operatorname{sech}^2\left(\frac{z_l}{L}\right) \left[ \ln \left| \frac{\Delta_0 - \sqrt{\Delta_0^2 - \omega^2}}{\Delta_0 + \sqrt{\Delta_0^2 - \omega^2}} \right| - i\pi \right] + \right. \\ & \left. + \frac{\alpha \omega}{\pi^2} \left( \hbar v K - \frac{\pi}{2} \sqrt{\Delta_0^2 - \omega^2} \right) \right\}^{-1}, \end{aligned} \quad (26)$$

где  $\alpha = \frac{V^2 a^3}{\hbar^3 v^3}$ . Отсюда находим локальную плотность примесных состояний

$$\rho_{dd}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \operatorname{sign} \omega \operatorname{Im} G_{dd}(\omega) = \frac{\frac{1}{z} \operatorname{sign} \omega f_2(\omega)}{f_1^2(\omega) + f_2^2(\omega)}, \quad (27)$$

где

$$\begin{aligned} f_1(\omega) = & \omega - E_d + \frac{\alpha \omega}{\pi^2} \left( \hbar v K - \frac{\pi}{2} \sqrt{\Delta_0^2 - \omega^2} \right) - \\ & - \frac{\alpha \Delta_0}{8\pi} \omega \operatorname{sech}^2\left(\frac{z_l}{L}\right) \ln \left| \frac{\Delta_0 - \sqrt{\Delta_0^2 - \omega^2}}{\Delta_0 + \sqrt{\Delta_0^2 - \omega^2}} \right|, \end{aligned} \quad (28)$$

$$f_2(\omega) = \frac{\omega \alpha \Delta_0}{8} \operatorname{sech}\left(\frac{z_l}{L}\right). \quad (29)$$

В квазичастичном приближении уравнение

$$f_1(\omega) = 0 \quad (30)$$

определяет положение примесного уровня в системе симметричного инверсного контакта.

Конечная величина плотности примесных состояний связана с взаимодействием примесных и интерфейсных состояний. При удалении примеси от плоскости интерфейса пик плотности состояний резко увеличивается, и при  $z_l \rightarrow \infty \rho_{dd}(\omega) \sim \delta(\tilde{E}_d)$ , где  $\tilde{E}_d$  удовлетворяет уравнению (30) при  $z_l \rightarrow \infty$  и определяет положение перенормированного за счет взаимодействия с зонными состояниями примесного уровня в однородном полупроводнике. Как следует из (27),  $\rho_{dd}(0) = 0$ . Это обусловлено линейной зависимостью от энергии плотности интерфейсных состояний.

### 3. Обсуждение результатов

При  $z_l \rightarrow \infty$  уравнение (30) определяет положение примесного уровня  $\tilde{E}_d$  в однородном полупроводнике. При выполнении условия

$$E_d \leq \Delta_0 \left( 1 + \frac{\hbar v \alpha K}{\pi^2} \right) \quad (31)$$

это уравнение имеет решение, т.е. внутри щели появляется примесный уровень. Но, по определению параметра  $K$ , условие (31) нарушается, только когда затравочный уровень примеси  $E_d$  лежит очень высоко в разрешенной зоне. Однако этот случай уже нельзя рассматривать в рамках двухзонной схемы. Итак, благодаря взаимодействию с зонными электронами энергетический уровень примеси с необходимостью оказывается внутри запрещенной зоны. Используя этот результат, можно упростить выражение для  $f_1(\omega)$  (28), заменив второе и третье слагаемые перенормированным уровнем примеси  $\tilde{E}_d$ . Тогда в задаче вместо двух параметров  $E_d$  и  $K$  появляется один  $\tilde{E}_d$ .

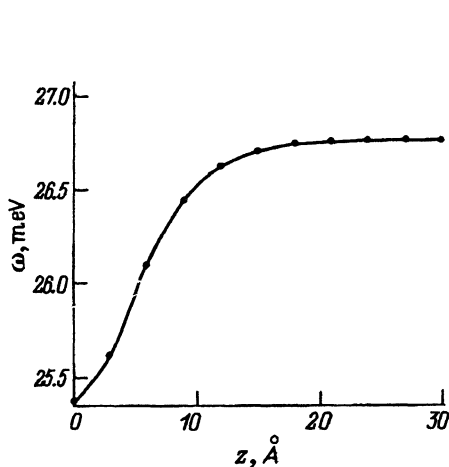


Рис. 1. Зависимость энергии примесного состояния от положения атома примеси на оси  $z$ .

Отсчет энергии относительно  $\mu$ .

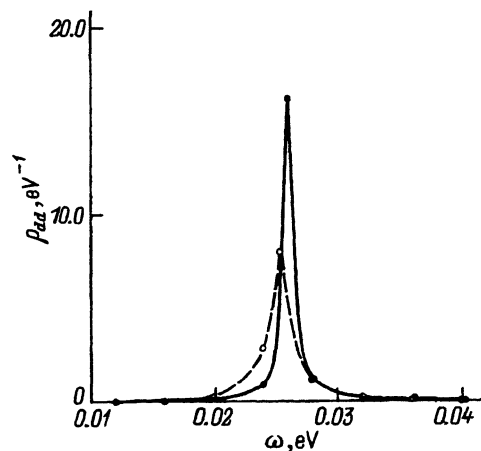


Рис. 2. Зависимость плотности примесных состояний от энергии для двух положений атома примеси:  $z_l = 0$  (пунктирная линия) и  $z_l = 6 \text{ \AA}$  (сплошная линия).

Отсчет энергии относительно  $\mu$ .



Уравнение (30) определяет положение примесного уровня в системе инверсного контакта. Это уравнение в рамках рассматриваемой модели всегда имеет решение внутри запрещенной зоны структуры. Благодаря взаимодействию между примесью и интерфейсными локализованными состояниями появляется зависимость энергии примесного уровня от местоположения атома примеси относительно гетерограницы. На рис. 1 показана зависимость энергии примесного состояния от положения атома примеси на оси  $z$ . Для численного расчета были использованы следующие параметры:  $V = 1 \text{ eV}$ ,  $v = 10^7 \text{ cm/s}$ ,  $E_d = 1 \text{ eV}$ ,  $a = 3.3 \text{ \AA}$ ,  $K = 3 \text{ eV}$ ,  $\Delta_0 = 0.1 \text{ eV}$ .

Из рис. 1 видно, что на гетерогранице примесный уровень прижимается к середине запрещенной зоны. При удалении от интерфейса уровень примеси стремится к своему предельному значению  $\tilde{E}_d$ . Очевидно, что при уменьшении взаимодействия между примесными и интерфейсными состояниями, т.е. при уменьшении параметра  $V$ , а также при увеличении скорости Ферми  $v$  этот эффект становится менее выраженным.

На рис. 2 показана зависимость плотности примесных состояний  $\rho_{dd}$  от энергии для двух положений атома примеси:  $z_l = 0$ , т.е. атом примеси находится на гетерогранице, и  $z_l = 6 \text{ \AA}$ . Как видно из этого рисунка, при удалении примесного атома от гетерограницы полуширина примесного уровня заметно уменьшается. При этом пик плотности состояний смещается в сторону больших энергий, стремясь к своему предельному значению  $\tilde{E}_d$ .

Итак, андерсоновская примесь вне зависимости от положения ее атомного уровня благодаря взаимодействию с зонными и интерфейсными состояниями инверсного контакта всегда дает примесный уровень энергии внутри запрещенной зоны, положение которого меняется при изменении положения примеси относительно плоскости интерфейса. Как уже отмечалось выше, интерфейсные состояния появляются не только в инверсном контакте, но и в нормальном гетеропереходе, когда  $E_{g_a} E_{g_b} > 0$ . Поэтому можно предположить, что полученные в настоящей работе особенности поведения примесного уровня должны наблюдаться и в нормальном гетеропереходе, в котором появляются интерфейсные состояния.

### Список литературы

- [1] Bastard G. Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures. Les Editions de Physique (1988). 357 p.
- [2] Yia-Chang C, Schulman J.N., Bastard G., Gulman Y., Voos M. Phys. Rev. B **31**, 4, 2557 (1985).
- [3] Cade N.A. J. Phys. C. **18**, 5135 (1985).
- [4] Волков Б.А., Панкратов О.А. Письма в ЖЭТФ **42**, 6, 145 (1985).
- [5] Тиходеев С.Г. ЖЭТФ **99**, 6, 1871 (1991).
- [6] Кисин М.В. ФТП **23**, 2, 292 (1989).
- [7] Канцер В.Г., Малкова Н.М. Письма в ЖЭТФ **54**, 7, 388 (1991).
- [8] Герчиков Л.Г., Рожков Г.В., Субашиев А.В. ЖЭТФ **101**, 1, 143 (1992).
- [9] Кайданов В.И., Немов С.А., Равич Ю.И. ФТП **26**, 2, 201 (1992).
- [10] Цидильковский И.М., Харус Г.И., Шелушинина Н.Г. Примесные состояния и явления переноса в бесщелевых полупроводниках. Свердловск: (1987). 152 с.
- [11] Anderson P.W. Phys. Rev. **124**, 1, 41 (1961).
- [12] Идлис Б.Г., Усманов М.Ш. ФТП **26**, 2, 329 (1992).
- [13] Narigaya K. J. Phys.: Cond. Matter **3**, 4841 (1991).