

М. ТОМАШЕК (ЧССР), В. Д. КУДРИН
**ПОВЕРХНОСТНЫЕ СОСТОЯНИЯ ЭЛЕКТРОНОВ
НА ПЛОСКОСТИ (111) КРИСТАЛЛОВ ГЕРМАНИЯ И КРЕМНИЯ**

(Представлено академиком Г. И. Марчуком 4 I 1971)

Общие свойства локализованных состояний электронов на поверхности полупроводников и их значение в химии и физике полупроводников хорошо известны (^{1, 2}). В предлагаемом сообщении приводятся некоторые новые результаты, полученные с помощью методики, разработанной авторами в обширном исследовании по энергетическим характеристикам поверхностных состояний (п.с.) полупроводников с решеткой типа алмаза, проведенном в 1961—1965 гг. Также кратко описывается и обсуждается теоретический метод, использованный в этом исследовании.

В работе (³) изложена основная идея, заключающаяся в применении метода одноэлектронных функций Грина (метода пропагаторов (⁴)) к расчету п.с. конечных кристаллов с решеткой алмаза. Авторы настоящей статьи усовершенствовали методику, предложенную в (³), и применили ее следующим образом.

Сначала рассчитывались одноэлектронные характеристики (энергии и волновые функции) бесконечного кристалла в представлении локализованных функций, т. е. искались собственные значения и собственные векторы матрицы одноэлектронного гамильтониана в этом представлении. При этом на каждом из двух атомов элементарной ячейки алмазоподобного кристалла учитывались 4 ортогональные орбиты — sp^3 -гибриды. В этом случае одноэлектронные энергии зависят от 13 независимых гибридных интегралов, которые следует определить так, чтобы упомянутые энергии наилучшим образом совпали с экспериментом (⁵). Опыт одного из авторов (^{1, 6}) и работа (⁷) полностью оправдали этот прием. Так как у конечного кристалла с поверхностью трансляционная группа симметрии двумерная, построенная на базе двух неколлинеарных элементарных трансляций a_2, a_3 , лежащих в плоскости рассматриваемой поверхности, то в пространстве обратной решетки появляется двумерная зона Бриллюэна, так называемая поверхностная зона Бриллюэна (п.з.Б.), в которой должны содержаться все допустимые п.с. Из рис. 1 видно, что п.з.Б. можно рассматривать тоже как двумерную элементарную ячейку обратного пространства с элементарными трансляциями b_2, b_3 , находящимися в одно-однозначном соответствии с трансляциями прямого пространства a_2, a_3 . Любое допустимое п.с. характеризуется парой чисел (η_2, η_3) , где η_2 и η_3 представляют собой некоторую долю векторов b_2 и b_3 соответственно. Они являются «хорошими» квантовыми числами рассматриваемой задачи. Расчет производился в следующей последовательности. Выбиралась точка (η_2, η_3) п.з.Б. Для нее рассчитывались одноэлектронные энергии и волновые функции бесконечного кристалла в представлении локализованных функций. С их помощью строились матричные элементы

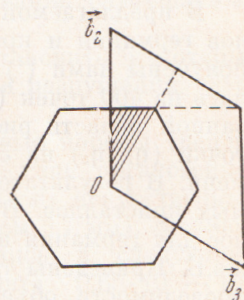


Рис. 1. Поверхностная зона Бриллюэна и элементарная ячейка обратного пространства для плоскости (111) кристалла типа алмаза

функции Грина, зависящие от η_2 , η_3 . Так как эти матричные элементы входят в качестве основных слагаемых в общую формулировку п.с. (³, ⁶), то вся характеристическая задача расчета п.с. решалась для каждой точки (η_2 , η_3) отдельно. Хочется подчеркнуть, что используемый метод настолько сильный, что позволяет решить проблему для «общей» точки (η_2 , η_3) п.з.Б. Обычные методы теории твердого тела ограничиваются «специальными» значениями (η_2 , η_3), соответствующими точкам или линиям высокой симметрии п.з.Б.

Таблица 1

	Si	Ge
Минимум зоны проводимости	0,0787 *	0,0485
Максимум полосы п. с.	0,0467	0,0407
Минимум полосы п. с.	-0,0443	-0,0487
Максимум валентной полосы	0,0	0,0

* Значения энергии приведены в ридбергах.

В предлагаемой работе рассчитывались п.с. плоскости (111) кристаллов германия и кремния. 13 гибридных интегралов для этих кристаллов получены нами (⁴) с помощью данных Дресселхауза (⁷). П.з.Б. разбивалась на 400 точек (η_2 , η_3). Из них только 44 точки, лежащие в заштрихованной области рис. 1, являются независимыми. Расчет п.с. для одной точки (η_2 , η_3) на ЭВМ М-220 требовал в среднем 7 мин. машинного времени. В результате получены полосы п.с. плоскости (111) рассматриваемых кристаллов. В табл. 1 приведены максимумы и минимумы этих полос для германия и кремния, полученные из рассчитанной системы точек п.з.Б. Приведены также максимумы валентных полос и минимумы полос проводимости объемных состояний. Видно, что полосы п.с. германия и кремния почти в одинаковой степени перекрываются с валентными полосами. Перекрывание немного больше в случае германия. Оказалось, что германий имеет аномальную структуру полосы п.с. Максимум полосы лежит не в центре п.з.Б., как это обычно бывает, а на некотором расстоянии от него. Так как полоса п.с. заполнена только наполовину, то ее перекрывание с валентной полосой возможно, особенно для чистой (111) поверхности германия, использовать при толковании у нее поверхностной проводимости *p*-типа.

Авторы применяют разработанный метод для теоретического исследования разностей поверхностных энергий и поверхностных напряжений плоскостей (111), (110) и (100) кристаллов германия и кремния.

Выполненная работа — первая известная в литературе попытка полного расчета зоны п.с. с использованием реальной энергетической структуры объемных состояний кристалла.

Институт Физической химии
Чехословацкой Академии наук
Прага

Поступило
21 XII 1970

Вычислительный центр
Сибирского отделения Академии наук СССР
Новосибирск

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ М. Томášek, J. Kouřecký, Intern. J. Quant. Chem., **3**, 249 (1969). ² М. Томášek, Я. Коурецкий, В кн. Электронные явления в адсорбции и катализе на полупроводниках, М., 1969. ³ J. Kouřecký, M. Tomášek, Phys. Rev., **120**, 1212 (1960). ⁴ М. Томášek, J. phys. Coll., № 1, 115 (1970). ⁵ J. C. Slater, G. F. Koster, Phys. Rev., **94**, 1968 (1954). ⁶ М. Томášek, In: Structure and Chemistry of Solid Surfaces, N. Y., 1969. ⁷ G. Dresselhaus, M. S. Dresselhaus, Phys. Rev., **160**, 649 (1967).