

УДК 621.315.592

©1994

## ЗОННАЯ СТРУКТУРА СВЕРХРЕШЕТОК С $\delta$ -СЛОЯМИ НА ОСНОВЕ ПОЛУПРОВОДНИКОВ С ВЫРОЖДЕННОЙ ВАЛЕНТНОЙ ЗОНОЙ

*А.Т.Гаджиев, Н.Ф.Гашимзаде*

Вычислена зонная структура сверхрешетки с  $\delta$ -потенциалом с учетом взаимодействия между носителями разного сорта. Рассмотрены сверхрешетки, составленные из полупроводников с вырожденной валентной зоной, а также из бесщелевых полупроводников. В последнем случае показана возможность перехода полуметалл-полупроводник.

Взгляд на работы, сделанные в последние годы, показывает, что интерес к квантовым ямам и сверхрешеткам на основе узкощелевых и бесщелевых полупроводников не угасает. Теоретические работы в этой области основываются обычно на трех методах: методе псевдопотенциала [1], методе сильной связи [2] и методе огибающих функций [3]. Имеются также работы, выполненные комбинированием этих методов [4]. Метод огибающих отличается простотой и позволяет более полно проанализировать результаты. Однако даже в этом случае при учете нескольких зон граничные условия сильно усложняются. Поэтому в большинстве работ рассматриваются отдельно взятые зоны. Это приводит в свою очередь к исключению взаимодействия между зонами, ведущего к трансформации между носителями при их столкновении с границами слоев. Недавняя работа [3], учитывающая многозонность и непараболичность спектра носителей, в этом смысле заслуживает особого внимания.

В настоящей работе получено аналитическое выражение, описывающее структуру валентной зоны сверхрешетки с учетом взаимодействия между легкими и тяжелыми дырками. Это взаимодействие приводит к трансформации носителей, движущихся в плоскости слоя. Рассмотренная модель описывает также взаимодействие электронов и тяжелых дырок в сверхрешетках из бесщелевого полупроводника. Взаимодействие между носителями разных сортов объясняет происхождение поверхностных состояний и переход полупроводник-полуметалл в указанных сверхрешеточных системах и не может быть проигнорировано.

Рассмотрим сверхрешетку с потенциалом в виде дираковской гребенки

$$V(z) = V_0 \delta(z - md), \quad (1)$$

где  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ ;  $d$  — период сверхрешетки;  $V_0$  — мощность потенциала.

При такой постановке задачи она сильно конкретизируется, охватывая лишь сверхрешетки, в которых слои одного типа имеют толщину  $d$ , а соседние слои подобно монослоям [5] описываются потенциалом (1). Несмотря на простоту такой модели, она дает ясное аналитическое решение, поддающееся качественному анализу в широком масштабе изменения параметров спектра. Поэтому в перспективе она является удобной, например, для учета воздействия разных полей на энергетическую структуру носителей в таких системах. (Решение такой задачи может быть полезно также с методической точки зрения).

Рассмотрим сверхрешетку на основе полупроводника типа GaAs с вырожденной валентной зоной. Предположим, что толщина слоев второй компоненты бесконечно мала, и поэтому не будем интересоваться его зонной структурой, описывая ее лишь одним параметром  $V_0$ .

Предположим, что спектр носителей описывается гамильтонианом Латтинжера [6]

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} F & H & J & 0 \\ H^* & G & 0 & J \\ J^* & 0 & G & -H \\ 0 & J^* & -H^* & F \end{pmatrix}, \quad (2)$$

где

$$F = (A + B/2)k^2 + (A - B)q^2, \quad G = (A - B/2)k^2 + (A + B)q^2,$$

$$H = -Dkq, \quad J = \frac{\sqrt{3}}{2}Bk^2, \quad k = k_x, \quad q = k_z,$$

$A, B, D$  — постоянные спектра, ось  $Z$  направлена перпендикулярно плоскости слоев, а ось  $X$  — вдоль движения носителей. Будем решать задачу в изотропном приближении, когда

$$D^2 = 3B^2. \quad (3)$$

Потенциал (1) не снимает вырождения в (2), связанного инверсией времени. Поэтому с помощью известного преобразования [7] гамильтониан (2) можно привести к блочно-диагональному виду с двумя эквивалентными (с точностью до комплексного сопряжения) блоками ( $2 \times 2$ )

$$\mathcal{H}^* = \begin{pmatrix} F & -H + iJ \\ -H - iJ & G \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Волновую функцию сверхрешетки выберем в следующем виде:

$$\Psi = \sum_{i=1,2} \left( A_i \Phi_i(q_i) e^{iq_i z} + B_i \Phi_i(-q_i) e^{-iq_i z} \right), \quad (5)$$

где

$$\Phi_1 = \begin{pmatrix} 2q_1 - ik \\ -\sqrt{3}k \end{pmatrix}, \quad \Phi_2 = \begin{pmatrix} \sqrt{3}k \\ 2q_2 + ik \end{pmatrix} \quad (6)$$

— собственные функции гамильтониана (4);  $A_i, B_i$  — коэффициенты,

$$q_i = \sqrt{\frac{2m_i E}{\hbar^2} - k^2}, \quad (7)$$

$i = 1, 2$  относится соответственно тяжелым и легким дыркам

$$m_{1,2}^{-1} = \frac{2(A \mp B)}{\hbar^2}.$$

В сверхрешетке функция (5) должна удовлетворять условию периодичности

$$\Psi(z + d) = \Psi(z)e^{iQd}, \quad (8)$$

где  $Q$  — волновой вектор сверхрешетки  $-\pi/d \leq Q \leq \pi/d$ .

Для определения коэффициентов в (5) используются два условия. Одним из них является условие непрерывности волновой функции на границе ( $z = 0$ ). Второе условие получается интегрированием уравнения Шредингера вблизи поверхности слоя. Полученная таким образом система из четырех уравнений однородна. Условием ее разрешимости является равенство нулю определителя этой системы. Решение полученного уравнения приводит к одному действительному выражению для обоих сортов носителей, определяющему их спектр в сверхрешетке

$$\left(4K_1 + \frac{\alpha}{q_1} \sin q_1 d\right) \left(4K_2 + \frac{\beta\alpha}{q_2} \sin q_2 d\right) = \frac{3(V_0 k)^2}{4K_1 K_2 E^2} \left[ \sin^2 Qd (K_1 - K_2)^2 - \left( \frac{\sin q_1 d}{q_1} K_2 - \frac{\sin q_2 d}{q_2} K_1 \right) (q_2 K_1 \sin q_2 d - q_1 K_2 \sin q_1 d) \right]. \quad (9)$$

Здесь приняты следующие обозначения:

$$K_i = \frac{\cos Qd - \cos qd}{2}, \quad \beta = \frac{m_2}{m_1}, \quad \alpha = \frac{2m_1 V_0}{\hbar^2}.$$

Левая часть уравнения (9) при  $k = 0$  описывает независимое квантование легких и тяжелых дырок, т. е. при движении вдоль оси сверхрешетки носители не взаимодействуют; правая часть является следствием взаимодействия разных типов носителей и отлична от нуля лишь при  $k \neq 0$ .

Рассмотрим (9) в центре и на границе зоны. Для этого положим соответственно  $Q = 0; \pi/d$  и запишем дисперсионное уравнение в следующем виде:

$$c_1 = -c_2 f - \frac{\lambda\alpha}{q_1} \pm \left( c_2^2 (f^2 - 1) + 2\lambda\alpha c_2 \left( \frac{f}{q_1} - \frac{\beta}{q_2} \right) + \lambda \left( \frac{\lambda\alpha^2}{q_1^2} - 4 \right) \right)^{1/2}, \quad (10)$$

где

$$c_i = \gamma \left( \operatorname{ctg} \frac{q_i d}{2} \right)^\gamma, \quad \gamma = e^{iQd}, \quad \lambda = \frac{4E^2}{3V_0^2 k^2},$$

$$f = \frac{4k^4 + k^2(q_1^2 + q_2^2) + 4q_1^2 q_2^2}{6kq_1 q_2}. \quad (11)$$

Два знака перед корнем в (10) соответствуют состояниям разной четности. Это уравнение позволяет проследить характер четности минизон даже при  $k \neq 0$ .

В уравнении (10), полагая  $Q = 0$  и  $\lambda \rightarrow 0$  ( $V_0 \rightarrow \infty$ ), т.е. рассматривая слой полупроводника толщиной  $d$  между бесконечно высокими стенками, можно получить состояния носителей в пленке

$$\operatorname{ctg} \frac{q_1 d}{2} \operatorname{tg} \frac{q_2 d}{2} = -f \pm (f^2 - 1)^{1/2}. \quad (12)$$

Это уравнение идентично основной формуле работы [8].

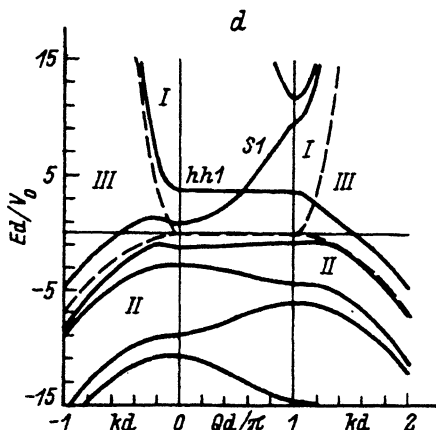
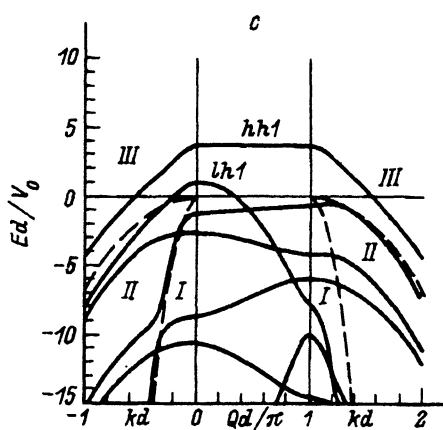
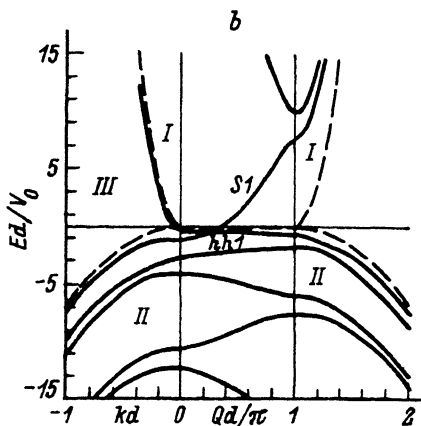
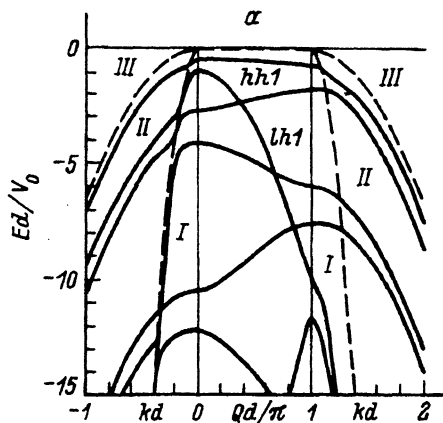
В уравнении (10)  $V_0$  и  $\beta$  могут принимать положительные и отрицательные значения (при отрицательном значении  $\beta$  уравнение (10) описывает сверхрешетки из бесщелевого полупроводника типа HgTe). Комбинируя их знаки, можно рассмотреть четыре различных случая. Далее проанализируем каждый случай, соответствующий определенной сверхрешеточной системе, в отдельности.

1.  $\beta > 0$ ,  $V_0 > 0$ . При таком выборе знаков потенциальные ямы, находящиеся между соседними  $\delta$ -слоями, будут иметь притягивающий характер для дырок. Все минизоны, рассчитанные с помощью (10), (см. рисунок, *a*) находятся внутри потенциальной ямы. Область зависимости  $E$  от  $k$  делится на три области кривыми  $E = \hbar^2 k^2 / 2m_i$  ( $i = 1, 2$ ). В области I оба  $q_1$  и  $q_2$  вещественны; в области II  $q_1$  вещественно,  $q_2$  мнимо; в области III  $q_1$  и  $q_2$  мнимы. При расчете были использованы следующие значения параметров:  $\beta = 0.067$ ,  $d = 150 \text{ \AA}$ ,  $V_0 = 1.2 \cdot 10^{-8} \text{ eV} \cdot \text{cm}$ ,  $m_1 = 0.4m_0$  ( $m_0$  — масса свободного электрона).

Несмотря на изначальную конкретизацию задачи, сравнение рисунка, *a* с соответствующими рисунками в работах [3,4] показывает, что качественному изменению результатов это не приводит.

2.  $\beta < 0$ ,  $V_0 > 0$ . Этот случай соответствует сверхрешетке из бесщелевого полупроводника. Положение соответствующее данной ситуации отличается от предыдущего тем, что  $\delta$ -барьеры для дырок являются одновременно потенциальными ямами для электронов. Все электронные минизоны, кроме одной, находятся выше потенциальной ямы и содержат несвязанные состояния. С увеличением  $V_0$  зона, которая находится в  $\delta$ -яме (S1), опускается. При стремлении  $V_0$  к бесконечности S1 зона исчезает, а остальные минизоны при  $Q = 0$  переходят к плечным состояниям. При  $Q = 0$  кривая, исходящая от минизоны hh1 (см. рисунок, *b*), носит электронный характер и при  $kd \gg 1$  описывает поверхностное состояние, аналогичное возникающему на границе полуметалл-вакуум [9]. Соответствующие волновые функции, имея максимум в каждом  $\delta$ -слое, сильно уменьшаются внутри соседнего слоя конечной толщины.

В работе [3] показано, что с изменением толщины слоев возможно перемещение S1 как выше минизоны hh1, так и ниже любой дырочной минизоны. В этом случае самая верхняя из указанных зон при  $Q = 0$  носит электронный характер и описывает поверхностные состояния. Эти рассуждения остаются справедливыми и в нашем случае. Такие же перемещения минизон можно получить с изменением  $V_0$ . Однако в рамках нашей модели при сколь угодно малом значении  $V_0$  S1 остается ниже минизоны hh1. Это связано с тем, что толщина  $\delta$ -слоев предполагается нулевой.



Минизоны тяжелых и легких дырок (a,c) и электронов и дырок (b,d) в сверхрешетке.

Пунктирные линии — границы областей I, II, и III. Использованы следующие значения параметров:  $\beta = 0.067$ ,  $d = 150 \text{ \AA}$ ,  $|V_0| = 1.2 \cdot 10^{-8} \text{ eV} \cdot \text{cm}$ ,  $m_1 = 0.4m_0$ .  $\beta > 0$ ,  $V_0 > 0$  (a);  $\beta < 0$ ,  $V_0 > 0$  (b);  $\beta > 0$ ,  $V_0 < 0$  (c);  $\beta < 0$ ,  $V_0 < 0$  (d).

На краю зоны Бриллюэна (при  $Q = \pi/d$ ) в противоположность центру ( $Q = 0$ ) S1 имеет электронный, а hh1 — дырочный характер. Система в целом является полуметаллической. С увеличением мощности потенциала S1 смещается вниз. При определенном значении  $V_0$  на краю зоны S1 опускается ниже hh1. Начиная с этого значения  $V_0$ , S1 является дырочной, а hh1 — электронной зоной и сверхрешетка становится полупроводником, ширина запрещенной зоны которого зависит от мощности  $\delta$ -потенциала.

3.  $\beta > 0$ ,  $V_0 < 0$ . При таком выборе знаков  $V_0$  и  $\beta$  потенциал в  $\delta$ -слоях является притягивающим для дырок. В результате в  $\delta$ -яме оказываются две минизоны lh1 и hh1, соответствующие легким и тяжелым дыркам. Все остальные минизоны находятся выше потенциальной ямы (см. рисунок, c). С уменьшением мощности потенциала минизоны выталкиваются из ямы. Так, при  $k = 0$  край минизоны lh1 (при  $Q = \pi/d$ )

выходит из ямы при  $|V_0| \leq V_0^* = 2\hbar^2/m_2d$ , а hh1 — при  $|V_0| \leq \beta V_0^*$ . Если указанные минизоны находятся внутри  $\delta$ -ямы, то исходящие из них зоны при  $k = 0$  носят поверхностный характер и их волновые функции имеют максимум в каждом  $\delta$ -слое. Что касается центра зоны ( $Q = 0$ ), то при любых значениях  $V_0$  зоны, исходящие из hh1 и hh1, характеризуют поверхностные состояния. При  $k = 0$  и  $|q_i d| \gg 1$  энергии этих состояний зависят от  $V_0$

$$E_i = \frac{m_i}{2} \left( \frac{V_0}{\hbar} \right)^2 \quad (13)$$

и не зависят от  $d$ . Таким образом, с изменением  $V_0$  изменяется как энергия этих состояний, так и расстояние между ними

$$\Delta E = \frac{1 - \beta}{2\hbar^2} m_1 V_0^2.$$

Отметим, что (13) соответствует предельному решению, найденному в работе [10] для двумерных состояний носителей в одиночной квантовой яме.

Из рисунка, с видно, что поверхностные дырочные состояния существуют вне потенциальной ямы.

4.  $\beta < 0$ ,  $V_0 < 0$ . Последняя ситуация соответствует сверхрешетке из бесщелевого полупроводника, разделенного  $\delta$ -слоями, являющимися потенциальными барьерами для электронов. В этом случае электронные минизоны находятся в потенциальной яме, образованной двумя соседними  $\delta$ -барьерами. В свою очередь  $\delta$ -слои являются потенциальными ямами для дырок. Однако, кроме первой дырочной минизоны (hh1), все остальные находятся вне ямы.

Зонная структура такой системы показана на рисунке,  $d$ . В центре зоны Бриллюэна hh1 является электронной, а S1 — дырочной зоной. С увеличением  $Q$  эти минизоны пересекаются, и при  $Qd = \pi$  hh1 становится дырочной, а S1 — электронной зоной. Таким образом, система является полуметаллической. При  $kd > \pi$  имеются две дырочные зоны, содержащие связанные состояния. Одна зона исходит из S1 при  $Q = 0$ , а другая — из hh1 при  $Q = \pi/d$ . Заметим, что при  $kd \gg 1$  поверхностные состояния выходят из  $\delta$ -ямы.

### Список литературы

- [1] Gell M.A., Ninno D., Jaros M., Herbert D.C. // Phys. Rev. 1986. V. B34. N 4. P. 2416–2427.
- [2] Krishnamurthy S., Moriarty J.A. // Phys. Rev. 1985. V. B32. P. 1027–1031.
- [3] Герчиков Л.Г., Рожнов Г.В., Субашиев А.В. // ЖЭТФ. 1992. Т. 101. № 1. С. 143–162.
- [4] Yia-Chung Chang // Phys. Rev. 1988. V. B37. P. 8215–8222.
- [5] Schneider H., Fischer A., Ploog K. // Phys. Rev. 1992. V. B45. P. 6329–6334.
- [6] Ансельм А.И. Введение в теорию полупроводников. М., 1978. С. 615.
- [7] Broido D.A., Sham L.I. // Phys. Rev. 1985. V. B31. N 2. P. 888–892.
- [8] Дьяконов М.И., Хаецкий А.В. // ЖЭТФ. 1982. Т. 82. № 5. С. 1584–1590.
- [9] Дьяконов М.И., Хаецкий А.В. // Письма в ЖЭТФ. 1981. Т. 33. № 2. С. 115–118.
- [10] Гашимзаде Н.Ф., Пашабекова У.С. // ФТП. 1991. Т. 25. № 12. С. 2217–2219.