

ПОГРАНИЧНЫЕ СОСТОЯНИЯ ЭЛЕКТРОННОГО ТИПА В ИНВЕРСНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ

Кисин М. В.

Показана возможность существования невырожденных двумерных состояний с электронным типом дисперсии в инверсных гетеропереходах типа CdTe—HgTe или CdTe— α -Sn. Эти состояния аналогичны поверхностным состояниям в бесщелевых полупроводниках и связаны с описанными ранее пограничными состояниями зоны проводимости нормальных (неинверсных) гетеропереходов.

Основной физической особенностью гетеропереходов типа CdTe—HgTe или CdTe— α -Sn с инверсией зон на гетерогранице является возможность существования на границе раздела двумерных подзон невырожденных пограничных состояний [1, 2]. Возникновение таких состояний принято объяснять разным знаком эффективной массы легких носителей заряда в материалах гетеропары. Действительно, при использовании граничных условий, сохраняющих поток волновой функции через гетерограницу, последнее обстоятельство делает возможной сшивку волновых функций, экспоненциально затухающих в обоих контактирующих полупроводниках. Например, если зона одного типа симметрии в материалах A и B описывается эффективным уравнением Шредингера вида

$$\hat{H}_{A,B}\Psi = \left(\frac{\hat{\mathbf{k}}^2}{2m_{A,B}} + E_{vA,B} \right) \Psi = \left[\frac{1}{2m_{A,B}} (K^2 - q_{A,B}^2) + E_{vA,B} \right] \Psi = E\Psi, \quad (1)$$

то для пограничных состояний с волновой функцией

$$\Psi_{A,B} \sim \exp(\pm q_{A,B}x + iKy), \quad q_{A,B} > 0 \quad (2)$$

из непрерывности величин

$$\Psi \text{ и } \frac{\hat{k}_x}{m_{A,B}} \Psi, \quad (3)$$

обеспечивающей непрерывность x -компоненты потока

$$S_x = \Psi + \frac{\hat{k}_x}{m} \Psi + \left(\frac{\hat{k}_x}{m} \Psi \right)^* \Psi, \quad (4)$$

нетрудно получить условие

$$\frac{q_A}{m_A} + \frac{q_B}{m_B} = 0, \quad (5)$$

которое имеет смысл именно при $m_A m_B < 0$, т. е. при инверсии зон на гетерогранице. Условия (5) и (1) определяют закон дисперсии пограничных состояний в данном простом модельном случае (рис. 1)

$$E_1 = \frac{\Delta_v m_B}{m_B - m_A} + \frac{K^2}{2} \left(\frac{1}{m_A} + \frac{1}{m_B} \right). \quad (6)$$

Приведенный пример достаточно наглядно показывает механизм описания спектра пограничных состояний, однако для интересующих нас гетероструктур

необходимо пользоваться более сложными зонными моделями. В частности, если рассматривается небольшой энергетический интервал вблизи потолка валентной зоны бесщелевого полупроводника (у нас — материал B) или если разрыв валентной зоны Δ_v существенно меньше значений энергетических щелей $E_{gA, B}$, то можно воспользоваться гамильтонианом Латтинжера.

Картина спектра пограничных состояний при этом существенно меняется. Так, например, при $K=0$ пограничные состояния, полученные в работе [2] в рамках модели Латтинжера, определяются легкими частицами и совпадают с (6). Однако при $K \neq 0$ смешивание с состояниями тяжелых дырок бесщелевого полупроводника приводит к делокализации волновой функции пограничного состояния.

Принято считать, что при наличии тяжелых дырок пограничные состояния валентной зоны единичного гетероперехода существуют только в форме резонансов [2, 3].

В настоящей работе будет показано, что в инверсном контакте кейновских полупроводников пограничные состояния резонансного типа не являются единственно возможными. Действительно, в ранней работе [4] при моделировании

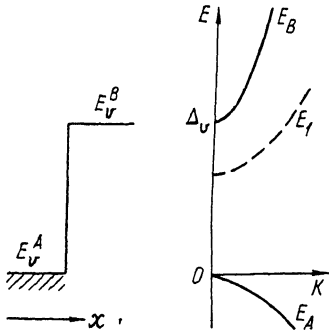


Рис. 1. Пограничные состояния в однозонной модели инверсного контакта.

поверхности бесщелевого полупроводника нулевыми граничными условиями на волновую функцию были предсказаны квазиповерхностные состояния, имеющие в случае $HgTe$ электронный тип дисперсии. При этом примесь состояний тяжелых дырок в волновой функции не приводила к делокализации поверхностных состояний. Ясно, однако, что при рассмотрении гетероконтакта бесщелевого полупроводника с достаточно широкозонным полупроводником (диэлектриком) граничные условия, сохраняющие поток волновой функции, должны сводиться к нулевым. Следовательно, по крайней мере в небольшом энергетическом интервале вблизи потолка валентной зоны бесщелевого полупроводника должна также существовать ветвь хорошо определенных (нерезонансных) пограничных состояний с электронным законом дисперсии.

В используемой системе координат, где $\hat{k}_z \Psi \equiv 0$, гамильтониан Латтинжера выбором базисных функций можно привести к субдиагональному виду

$$\hat{H}_L = -\left(\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma\right)\hat{k}^2 + 2\gamma(\hat{k}J)^2 =$$

$$= \begin{bmatrix} \hat{H}_1 & 0 \\ 0 & \hat{H}_{-1} \end{bmatrix}, \quad \hat{H}_\mu = -\begin{bmatrix} (\gamma_1 + \gamma)\hat{k}^2 & \sqrt{3}\gamma\hat{k}_\mu^2 \\ \sqrt{3}\gamma\hat{k}_\mu^2 & (\gamma_1 - \gamma)\hat{k}^2 \end{bmatrix}, \quad (7)$$

где $\hat{k}_\mu = \hat{k}_x + i\mu\hat{k}_y$, квантовое число $\mu = \pm 1$ характеризует спиновое состояние, а субматрица с $\mu = 1$, например, соответствует базис из собственных функций момента $3/2$ [6]

$$\left|\frac{3}{2}; \frac{3}{2}\right\rangle = (X + iY)\uparrow\sqrt{2}, \quad \left|\frac{3}{2}; -\frac{1}{2}\right\rangle = [(X - iY)\uparrow + 2Z\downarrow]/\sqrt{6}. \quad (8)$$

Поток в модели Латтинжера определяется следующим образом:

$$S_x = \frac{\partial \hat{H}_L}{\partial \hat{k}_x} = \Psi^+ \left\{ \frac{1}{2} \left(\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma \right) \hat{k}_x - \frac{\gamma}{2} [J_x(\hat{k}J) + (\hat{k}J)J_x] \right\} \Psi +$$

+ эрмитово сопряженное, (9)

поэтому условия, аналогичные (3), будут заключаться в непрерывности

$$\Psi \text{ и } \left\{ \frac{1}{2} \left(\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma \right) \hat{k}_x - \frac{\gamma}{2} [J_x(\hat{k}J) + (\hat{k}J)J_x] \right\} \Psi, \quad (10)$$

что в выбранном базисе сводится к непрерывности

$$\Psi_{1, 2\mu} \text{ и } \begin{bmatrix} (\gamma_1 + \gamma) \hbar x & \sqrt{3} \gamma \hbar_{-\mu} \\ \sqrt{3} \gamma \hbar_{\mu} & (\gamma_1 - \gamma) \hbar x \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \Psi_{1\mu} \\ \Psi_{2\mu} \end{pmatrix}. \quad (11)$$

Необходимо отметить, что граничные условия типа (11) предполагают отсутствие смешивания на гетерогранице спиновых состояний с разными μ . При этом в граничные условия вообще не входят какие-либо параметры, характеризующие микроструктуру гетерограницы, что, безусловно, является сильным упрощающим предположением. Такого типа параметры, в том числе и приводящие к смешиванию состояний с разными μ , могут быть введены в теорию феноменологически аналогично тому, как это делается при описании междолинного Γ - X -смешивания [6]. Заметим также, что ограничение объекта исследования плавными гетеропереходами, как это сделано в работе [7], в этом плане не меняет ситуацию, поскольку возможность описания гетероперехода исключительно квазипотенциальными функциями координат, стоящими на главной диагонали матричного гамильтониана, также является лишь предположением.

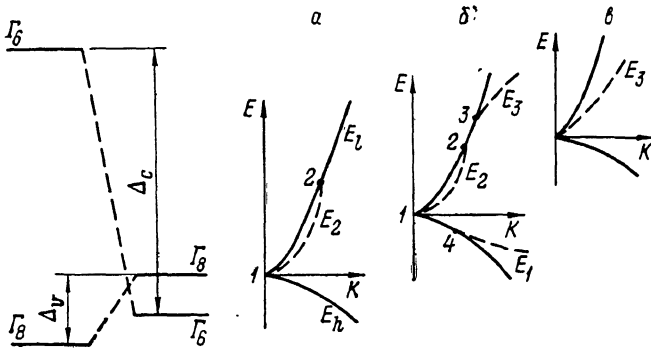


Рис. 2. Пограничные состояния в инверсном гетеропереходе кейновских полупроводников.

Граничные условия (11) дают возможность сплести на гетерогранице линейные комбинации собственных функций гамильтониана (7), затухающих в обоих полупроводниках. Приравняв к нулю детерминант полученной системы линейных алгебраических уравнений, находим условие, аналогичное (5),

$$\det \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ \frac{1}{3} F_l^A(-\mu) & -F_h^A(-\mu) & \frac{1}{3} F_l^B(\mu) & -F_h^B(\mu) \\ -\Phi_l^A(-\mu) & -\Phi_h^A(3\mu) & \Phi_l^B(\mu) & \Phi_h^B(-3\mu) \\ -\frac{1}{3} F_l^A(-\mu) \Phi_l^A(3\mu) & F_h^A(-\mu) \Phi_h^A(-\mu) & \frac{1}{3} F_l^B(\mu) \Phi_l^B(-3\mu) & -F_h^B(\mu) \Phi_h^B(\mu) \end{bmatrix} = 0, \quad (12)$$

$$F_{(l, h)}^{(A, B)}(\mu) = 1 + \frac{2\mu K}{q_{(l, h)}^{(A, B)} - \mu K}, \quad \Phi_{(l, h)}^{(A, B)}(\mu) = \frac{q_{(l, h)}^{(A, B)}}{2m_{(l, h)}^{(A, B)}} + \mu K \gamma^{(A, B)},$$

где

$$(q_{l, h}^{A, B})^2 = K^2 + 2m_{l, h}^{A, B} E_{A, B}, \quad E_A = E_B + \Delta_0. \quad (13)$$

Для качественного понимания картины спектра интересующих нас пограничных состояний зоны проводимости наиболее важен предел больших Δ_0 и E_{gA} . В этом случае граничные условия (11) сводятся к нулевым, а волновая функция пограничного состояния оказывается целиком лежащей в бесщелевом полупроводнике, и из (12) следует

$$q_l - \beta q_h = \frac{1}{2} \mu K (1 + \beta), \quad \beta = \frac{|m_l|}{m_h}. \quad (14)$$

При $\beta < 1/3$, что характерно для рассматриваемых гетерограниц CdTe—HgTe или CdTe— α -Sn, соотношения (13), (14) описывают ветвь невырожденных пограничных состояний E_2 с $\mu \text{ sign } K=1$, имеющих электронный характер дисперсии. В рассматриваемом предельном случае наши результаты совпадают с выводами работы [4], где достаточно подробно проанализирована картина спектра на параболлическом участке, т. е. при малых K .

Наиболее интересный вопрос, ответ на который не может быть получен в рамках модели Латтинжера, связан с поведением ветви E_2 при больших K . В этом случае необходимо учитывать конечные значения $\Delta_{c,v}$ и $E_{g1,v}$, т. е. пользоваться многозонной моделью Кейна. Чтобы получить наглядную картину спектра, ограничимся предельным случаем большого спин-орбитального взаимодействия и бесконечной массы тяжелых дырок. Приближение плоской зоны для тяжелых дырок в данном случае оправдано, поскольку нас интересуют состояния электронного типа при больших двумерных импульсах K , лежащие далеко от энергий $E_h(K)$. Условие существования пограничных состояний, аналогичное (6) и (12), было получено в работе [8] и имеет вид

$$\frac{2q_A + \mu K}{E_A} + \frac{2q_B - \mu K}{E_B} = 0, \quad (15)$$

где

$$q_{A,B}^2 = K^2 + \frac{3}{2P^2} E_{A,B} (E_{gA,B} - E_{A,B}). \quad (16)$$

В работе [9] для $E_{gB} > 0$ было показано, что пограничные состояния электронного типа E_3 существуют в гетероструктурах только при $\Delta_v > \Delta_c$. Анализ (15) при $E_{gB} < 0$ показывает, что описанная выше ветвь E_2 , существующая вблизи $K=0$ при любом соотношении разрывов зон Δ_c и Δ_v , в области больших K переходит в ветвь E_3 . Переход этот осуществляется сложным образом (рис. 2). При $E_{gB} < 0$ ветвь E_2 на гетерогранице с бесщелевым полупроводником существует всегда (она начинается от потолка валентной зоны бесщелевого полупроводника, точка 1). При $E_{gB} + \Delta_c > \Delta_v/4$ имеется точка ухода ветви E_2 в зону проводимости бесщелевого полупроводника (точка 2). При этом если $\Delta_v > \Delta_c$, то в точке 3, лежащей выше по энергии, от зоны проводимости бесщелевого полупроводника отщепляется ветвь пограничных состояний E_3 , описанная в работе [9]. При условии $E_{gB} + \Delta_c < \Delta_v/4$ точки 2 и 3 смыкаются, пограничные состояния E_2 и E_3 образуют одну ветвь спектра. Для гетерограницы CdTe—HgTe с $\Delta_v \sim 350$ мэВ должна иметь место картина спектра, представленная на рис. 2, а. Штрихами показан спектр пограничных состояний, сплошными линиями обозначен объемный спектр бесщелевого полупроводника, резонансные состояния не указаны.

Для полного понимания картины спектра пограничных состояний в инверсном контакте кейновских полупроводников отметим, что локализованные (резонансные) решения типа E_1 могут появиться в энергетической щели $E_1^B - E_h^B$, отщепляясь при конечном значении двумерного волнового вектора K_0 от объемного спектра тяжелых дырок E_h^B (точка 4). Условие такого ответвления $q_h^2=0$ удовлетворяется совместно с (12), например, для ветви пограничных состояний с $\mu \text{ sign } K=-1$ в пределе малых β при $K_0 \sim 4/3 \beta \sqrt{2m_h \Delta_v}$.

Список литературы

- [1] Chang Y. C., Schulman J. N., Bastard G., Guldner Y., Voos M. // Phys. Rev. B. 1985. V. 31. N 4. P. 2557—2560.
- [2] Lin-Liu Y. R., Sham L. J. // Phys. Rev. B. 1985. V. 32. N 8. P. 5561—5563.
- [3] Сокольский А. В., Суриц Р. А. // ФТП. 1987. Т. 21. В. 5. С. 866—870.
- [4] Дьяконов М. И., Хаяцкий А. В. // Письма ЖЭТФ. 1981. Т. 33. В. 2. С. 115—118.
- [5] Бир Г. Л., Пикус Г. Е. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М., 1972. 583 с.
- [6] Akera H., Wakakihara S., Ando T. // Surf. Sci. 1988. V. 196. N 3. P. 694—699.
- [7] Волков Б. А., Панкратов О. А. // Письма ЖЭТФ. 1985. Т. 42. В. 4. С. 145—148.
- [8] Суриц Р. А. // ФТП. 1986. Т. 20. В. 11. С. 2008—2015.
- [9] Кисин М. В. // ФТП. 1989. Т. 23. В. 2. С. 292—296.