ПРИГРАНИЧНЫЕ СОСТОЯНИЯ В ОГРАНИЧЕННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ СТРУКТУРАХ С ИНВЕРТИРОВАННЫМИ ЗОНАМИ

Идлис Б. Г., Усманов М. Ш.

На примере прямоугольной квантовой ямы конечных размеров с произвольными барьерами, образованной узкощелевыми полупроводниками с взаимно инвертированными зонами, изучены спектр пограничных состояний и правила отбора для оптических и магнитооптических переходов. При учете конечных размеров структуры спектр этих состояний становится щелевым, причем электронная и дырочная ветви спектра двукратно вырождены и отщепляются соответственно от верхней и нижней зон объемных состояний.

Известно, что в полупроводниковых структурах при определенных условиях могут возникать электронные состояния, локализованные вблизи границ раздела (приграничные состояния). В работе [1] предложен новый тип гетероперехода, в котором приграничное состояние появляется независимо от структуры переходного слоя и обусловлено лишь тем, что зоны полупроводников, образующие гетеропереход, взаимно инвертированы. Такой гетеропереход получил название инверсного контакта. Его можно реализовать на основе полупроводниковых соединений групп $A^{IV}B^{VI}$ и $A^{II}B^{VI}$ [2]. Кроме того, серое олово (α-Sn), выращенное на подложке из InSb, обладает по отношению к последней инвертированной зонной структурой [3].

В простейшем случае двухзонной модели инверсного контакта [1] внутри запрещенной зоны возникает невырожденное состояние, локализованное вблизи границы раздела и обладающее линейным спектром вдоль плоскости контакта (вейлевская ветвь). Длина локализации по обе стороны от контакта определяется величиной соответствующей щели. При достаточно широком переходном слое наряду с вейлевской ветвью имеется набор двукратно вырожденных состояний с конечной массой. В случае резкого контакта остается только вейлевская ветвь, причем при одинаковой работе выхода из полупроводников коническая точка лежит точно в середине запрещенной зоны. Связано это с тем, что гамильтониан, описывающий подобные структуры, приводится к суперсимметричной форме и вейлевская ветвь соответствует нулевой моде этого гамильтониана [4]. Учет более сложной (чем двухзонная) структуры, как, например, в $A^{II}B^{VI}$, качественно не меняет результатов [5].

В работах [6-8] благодаря наличию невырожденной нулевой моды в инверсном контакте предсказан ряд специфических явлений, таких как дробление фермионного заряда, аномальный холловский ток в отсутствие магнитного поля и др. Далее будет показано, что учет конечности размеров полупроводниковой структуры приводит к появлению щели в спектре локализованных состояний и двукратному вырождению электронно подобной и дырочно подобной ветвей этих состояний. При этом электронная ветвь отщепляется от верхней зоны объемных состояний, а дырочная — от нижней зоны. При стремлении размеров структуры к бесконечности щель обращается в нуль, однако «нулевая» мода в этом случае все равно остается двукратно вырожденной. Поэтому в реальных физических объектах с конечными размерами нулевая мода в том смысле, который вкладывался в нее в работах [6-8], отсутствует.

Кроме того, в настоящей работе на примере квантовой ямы с конечными размерами и произвольными барьерами изучен спектр приграничных состояний, получены правила отбора для оптических и магнитооптических переходов. В заключение показана эквивалентность подходов для расчета спектров подобных полупроводниковых структур на основе гамильтониана с пространственно зависящими энергетическими параметрами (ширина запрещенной зоны и работа выхода) и с помощью феноменологических граничных условий, предложенных в работе [9].

1. В двухзонном приближении спектр структуры из узкощелевых полупроводников (в которых имеет место инверсия зон) описывается уравнением Дирака с зависящей от координат шириной запрещенной зоны:

$$\hat{H}\hat{\psi} \equiv [\nu\gamma^0\boldsymbol{\gamma}\cdot\hat{\mathbf{p}} + \gamma^0\Delta(\mathbf{r}) + G(\mathbf{r})]\,\hat{\psi} = E\hat{\psi}, \tag{1}$$

где $2\Delta(\mathbf{r})$ — ширина запрещенной зоны в точке $\mathbf{r}$, $G(\mathbf{r})$ — работа выхода, также зависящая от координат, $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$, ν — матричный элемент межзонного перехода, который считается константой, γ^0 и $\boldsymbol{\gamma} = (\gamma^1, \gamma^2, \gamma^3)$ — соответствующие матрицы Дирака. Волновая функция $\hat{\psi}$ представляет собой столбец из спиноров ψ_1 и ψ_2, относящихся к двум ближайшим термам, формирующим зону проводимости и валентную зону полупроводниковой структуры.

В одномерном случае $\Delta = \Delta(z)$ и функцию $\hat{\psi}$ можно выбрать в виде $\hat{\psi} = \hat{\psi}(z)\exp(i\mathbf{k}_\perp\cdot\mathbf{r})$, где $\mathbf{k}_\perp = (k_x, k_y, 0)$. Тогда вместо (1) получим

$$\hat{H}\hat{\psi} \equiv [\nu\gamma^0\gamma^3\hat{p}_z + \hbar\nu\gamma^0(\boldsymbol{\gamma}\cdot\mathbf{k}_\perp) + \gamma^0\Delta(z) + G(z)]\,\hat{\psi}(z) = E\hat{\psi}(z). \tag{2}$$

Можно убедиться, что с гамильтонианом $\hat{H}$ коммутирует оператор $\hat{P}$:

$$\hat{P} = \gamma^5(\boldsymbol{\gamma}\cdot\mathbf{l}) = i\gamma^0\gamma^3(\boldsymbol{\gamma}\cdot\mathbf{k}_\perp)/k_\perp, \tag{3}$$

где $\mathbf{l}$ — единичный вектор в плоскости (x, y), перпендикулярный волновому вектору $\mathbf{k}_\perp : \mathbf{l} = [\mathbf{n}\times\mathbf{k}_\perp]/k_\perp$ ($\mathbf{n}$ — единичный вектор вдоль оси z). Собственные значения оператора $\hat{P}$ равны ± 1. Чтобы пояснить смысл оператора $\hat{P}$, представим его в виде

$$\hat{P} = i/2\,\gamma^0\varepsilon_{i,\,j,\,k}l_i\gamma^j\gamma^k = \gamma^0\hat{\Lambda}_l, \tag{4}$$

где $\hat{\Lambda}_l$ — оператор поворота на угол π вокруг направления $\mathbf{l}$. Поскольку γ^0 есть оператор инверсии координат, из (4) следует, что оператор $\hat{P}$ представляет собой оператор отражения в плоскости, проходящей через ось z и вектор $\mathbf{k}_\perp$. Поэтому его можно назвать оператором «псевдочетности» и он играет ту же роль, что и оператор спиральности для свободного движения релятивистского электрона. Заметим также, что с оператором $\hat{P}$ связан и оператор проекции спина на направление $\mathbf{l}$:

$$\hat{\Sigma}_l = (\hat{\boldsymbol{\Sigma}}\cdot\mathbf{l}) = \gamma^0\hat{P}. \tag{5}$$

В силу сказанного выше в качестве волновых функций гамильтониана (2) можно выбрать собственные функции оператора псевдочетности:

$$\hat{P}\hat{\psi}_\lambda(z) = \lambda\hat{\psi}_\lambda(z), \tag{6}$$

где $\lambda = \pm 1$. Тогда второй член в гамильтониане (2) сводится к выражению

$$\gamma^0(\boldsymbol{\gamma}\cdot\mathbf{k}_\perp) = -ik_\perp\gamma^3\hat{P}, \tag{7}$$

т. е. для $\hat{\psi}_\lambda(z)$ уравнение Дирака приобретает вид

$$\{\gamma^0[\nu\gamma^3\hat{p}_z + \Delta(z)] - i\gamma^3\lambda\hbar\nu k_\perp + G(z) - E\}\,\hat{\psi}_\lambda(z) = 0. \tag{8}$$

Положим сначала $G(z)=0$ (что эквивалентно постоянной работе выхода). Для матриц Дирака удобно выбрать представление, использованное в работе [1]:

$$\gamma^0=\begin{pmatrix}0 & i\\ -i & 0\end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\gamma}=\begin{pmatrix}i\boldsymbol{\sigma} & 0\\ 0 & -i\boldsymbol{\sigma}\end{pmatrix}, \quad \gamma^0\boldsymbol{\gamma}=\begin{pmatrix}0 & \boldsymbol{\sigma}\\ \boldsymbol{\sigma} & 0\end{pmatrix}. \tag{9}$$

Тогда решение уравнения (8) с учетом (6) можно представить в виде ($\partial_z\equiv\partial/\partial z$)

$$\hat{\psi}_\lambda(z)=\begin{pmatrix}1\\ i\lambda e^{i\Theta}\dfrac{\partial_z+\varkappa(z)}{\varepsilon+\lambda k_\perp}\\ -i\dfrac{\partial_z+\varkappa(z)}{\varepsilon+\lambda k_\perp}\\ \lambda e^{i\Theta}\end{pmatrix}\varphi(z), \tag{10}$$

где функция $\varphi(z)$ удовлетворяет «квадрированному» уравнению

$$\{[\partial_z-\varkappa(z)][\partial_z+\varkappa(z)]+\varepsilon^2-k_\perp^2\}\,\varphi(z)=0. \tag{11}$$

Здесь введены обозначения: $\varepsilon=E/\hbar v$, $\varkappa(z)=\Delta(z)/\hbar v$, $\exp(\pm i\Theta)=(k_x\pm ik_y)/k_\perp$.

Отметим, что в состоянии с волновой функцией $\hat{\psi}_\lambda$ среднее значение спина $\langle\Sigma\rangle$ направлено вдоль вектора $\mathbf{l}$ и в силу (5) равно

$$\Sigma(z)=\lambda\,(\hat{\psi}_\lambda^+\gamma^0\hat{\psi}_\lambda)=4\lambda\varphi(z)\,\frac{\partial_z+\varkappa(z)}{\varepsilon+\lambda k_\perp}\,\varphi(z). \tag{12}$$

Таким образом, положительная ($\lambda=+1$) и отрицательная ($\lambda=-1$) четности отвечают противоположным направлениям проекции спина на ось $\mathbf{l}$.

2. Рассмотрим теперь прямоугольную квантовую яму шириной $2a$, образованную полупроводником с инвертированными зонами, окруженным двумя разными полупроводниками с прямым расположением зон (рис. 1). В этом случае

$$\varkappa(z)=\varkappa+\varkappa_L+\varkappa_R-(\varkappa+\varkappa_L)\,\Theta(a+z)-(\varkappa+\varkappa_R)\,\Theta(a-z), \tag{13}$$

где $\theta(z)$ — единичная ступенчатая функция. Уравнение (11) можно решать в каждой области отдельно, учитывая то, что на границах раздела логарифмическая производная $\varphi(z)$ испытывает скачки:

$$\begin{aligned}(\delta\varphi'/\varphi)|_{-a}&=(\varkappa+\varkappa_L),\\ (\delta\varphi'/\varphi)|_{+a}&=-(\varkappa+\varkappa_R).\end{aligned} \tag{14}$$

В результате получим следующее дисперсионное уравнение:

$$\operatorname{th}(2qa)=\frac{q\,(q_L+q_R+\varkappa_L-\varkappa_R)}{(\varkappa+\varkappa_L)(\varkappa+\varkappa_R)-q^2-q_Lq_R+q_L(\varkappa+\varkappa_R)-q_R(\varkappa+\varkappa_L)}, \tag{15}$$

где $q^2=\varkappa^2+k_\perp^2-\varepsilon^2$, $q_{L,R}^2=\varkappa_{L,R}^2-\varkappa^2+q^2$. Пусть для определенности $|\varkappa|\leqslant|\varkappa_{L,R}|$. Тогда вещественные значения q отвечают уровням, локализованным у стенок квантовой ямы, мнимые значения q при вещественных q_L и q_R — уровням размерного квантования в яме, а мнимые значения q, q_L и q_R — делокализованным состояниям непрерывного спектра. Мы будем интересоваться локализованными состояниями, происхождение которых имеет ту же природу, что и вейлевская ветвь в одиночном инверсном контакте.

На рис. 2 для различных размеров ямы показаны зависимости от q левой и правой частей уравнения (15) для некоторого соотношения между параметрами $\varkappa$ и $\varkappa_{L,R}$. В частности, при $a\to\infty$ решением (15) является $q=\varkappa$ и $\varepsilon=\pm\lambda k_\perp$,

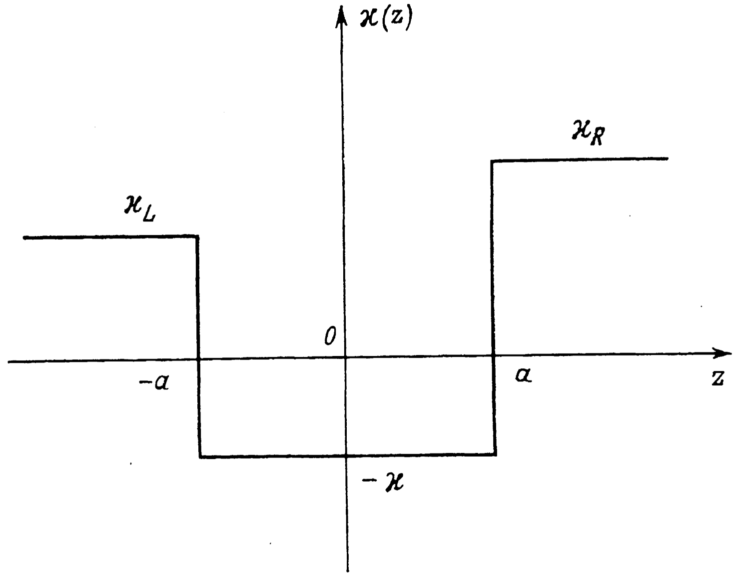

Рис. 1. Потенциальный рельеф для прямоугольной квантовой ямы.

$2a$ — размер ямы, $2\varkappa_L$, $2\varkappa_R$ и $-2\varkappa$ — значения запрещенной зоны соответствующих полупроводников.

т. е. нулевая мода оказывается двукратно вырожденной ($\lambda = \pm 1$), причем волновые функции этих состояний локализованы у противоположных границ. При уменьшении размеров ямы точка пересечения на рис. 2 смещается к началу координат и спектр локализованных состояний становится щелевым:

$$\varepsilon = \pm \sqrt{\kappa^2 - q^2 + k_\perp^2}. \tag{16}$$

По достижении размера ямы некоторого критического значения $a = a_c$ (зависящего от соотношения между κ и κ_L, κ_R) величина q становится чисто мнимой,

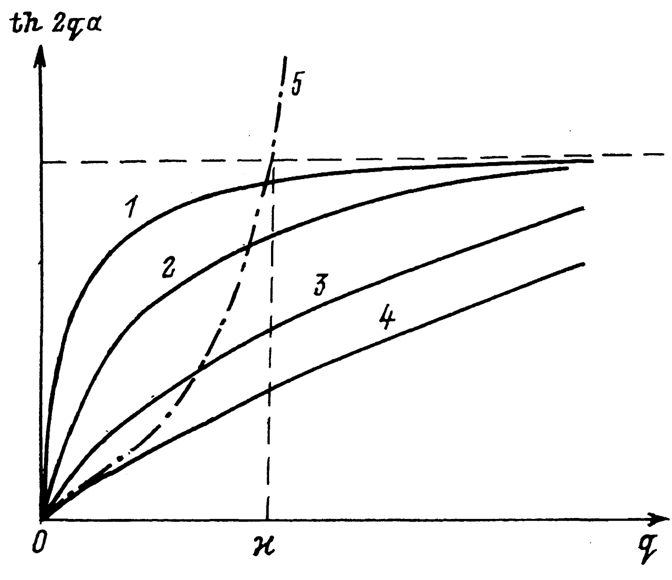

Рис. 2. К графическому решению дисперсионного уравнения (15).

1—4 — зависимости th $(2qa)$ для разных значений ширины ямы ($a_1 > a_2 > a_3 > a_4$), *5* — зависимость от q правой части уравнения (15). Решению $q = \varkappa$ соответствует $a \to \infty$.

т. е. оба уровня (16) переходят в уровни размерного квантования. Это свидетельствует о том, что электронно подобная и дырочно подобная ветви локализованных состояний отщепляются соответственно от верхней и нижней объемных зон. В связи с этим подчеркнем, что даже в случае отдельного инверсного контакта [6-8] нулевая мода реально вырождена, поскольку всегда имеется вторая граница раздела «инвертированного» полупроводника, например, с ваккуумом.

Вернемся к анализу уравнения (15). В общем случае выражение для a_c довольно громоздко. Для симметричной ямы ($\kappa_L = \kappa_R = \kappa_0$) дисперсионное уравнение совпадает с полученным в работах [10, 11]:

$$\operatorname{th}(2qa) = \frac{qq_0}{[\kappa(\kappa + \kappa_0) - q^2]}, \tag{17}$$

откуда следует, что

$$2a_c = \frac{1}{\kappa}\sqrt{\frac{\kappa_0 - \kappa}{\kappa_0 + \kappa}}. \tag{18}$$

В полностью симметричном случае ($\kappa = \kappa_0$) $a_c = 0$, т. е. локализованные у границ состояния есть при любом размере ямы.

3. Наибольшее значение $2a_c = 1/\kappa$ получается при $\kappa \ll \kappa_0$, что соответствует пленке из инвертированного полупроводника, окруженной диэлектриком. Оценка этой величины для полупроводников группы $A^{IV}B^{VI}$ ($2\Delta \simeq 100$ мэВ, $\nu = 3 \cdot 10^7$ см/с) дает $2a_c \simeq 200$ Å.

Для пленки можно наглядно продемонстрировать происхождение приграничных состояний. Действительно, в этом случае спектр системы полностью дискретен (в поперечном направлении) и дисперсионное уравнение имеет вид

$$\operatorname{th}(2qa) = \frac{q}{\kappa}. \tag{19}$$

Решения с чисто мнимыми значениями q отвечают уровням размерного квантования с $\varepsilon > |\kappa|$. Состояниям внутри запрещенной зоны ($\varepsilon < |\kappa|$) соответствуют вещественные q. Решение уравнения (19) показано графически на рис. 3 для полупроводника с прямым ($\kappa < 0$) инвертированным ($\kappa > 0$) расположением зон. Видно, что в первом случае имеются только уровни размерного квантования, которые при уменьшении щели просто сдвигаются ближе к ее краю. При дальнейшем изменении щели она, пройдя через нуль, становится отрицательной ($\kappa > 0$), а уровни по-прежнему непрерывным образом сдвигаются к краю, причем число их не меняется. Наконец, по достижении κ некоторой конечной величины (зависящей от толщины пленки $2a$) мнимое решение с минимальным по модулю значением q переходит в вещественное (рис. 3), т. е. ближайшие к краю запрещенной зоны электронный и дырочный уровни размерного квантования попадают внутрь щели, образуя рассматриваемые в данной работе приграничные состояния.

Для пленки наиболее простой вид имеет и волновая функция (10). В этом случае решением уравнения (11) с соответствующими граничными условиями (14) является

$$\varphi(z) = B \operatorname{sh}[q(a + z)], \tag{20}$$

где B — нормировочный коэффициент. Подставляя $\varphi(z)$ в (10), с учетом (19) получим

$$\hat{\psi}_\lambda(z) = B \begin{pmatrix} \operatorname{sh}[q(a+z)] \\ i\lambda e^{i\Theta} \dfrac{\sqrt{\varkappa^2 - q^2}}{\varepsilon + \lambda k_\perp} \operatorname{sh}[q(a-z)] \\ -i \dfrac{\sqrt{\varkappa^2 - q^2}}{\varepsilon + \lambda k_\perp} \operatorname{sh}[q(a-z)] \\ \lambda e^{i\Theta} \operatorname{sh}[q(a+z)] \end{pmatrix}, \tag{21}$$

$$B^2 = \frac{\varkappa^2 - q^2}{\varkappa - 2a(\varkappa^2 - q^2)} \frac{\varepsilon + \lambda k_\perp}{2\varepsilon}. \tag{22}$$

Отметим, что в состоянии с волновой функцией (21) максимумы распределения плотностей заряда и спина не совпадают в пространстве. Действительно, плотность заряда $n_\lambda(z)$ равна

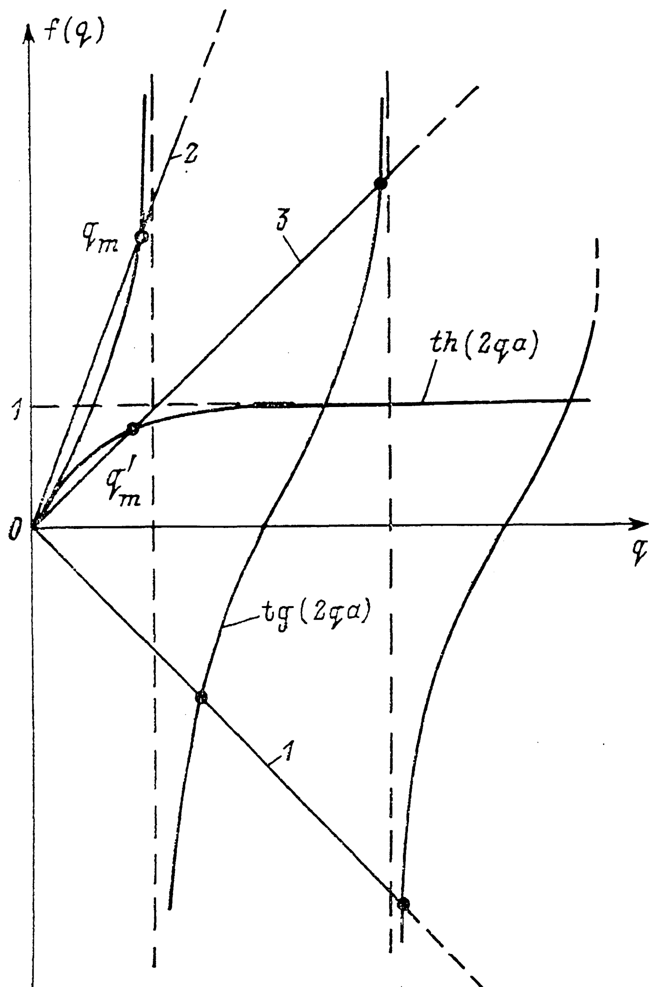

Рис. 3. К решению дисперсионного уравнения (19) для пленки.

Для положительной щели $\varepsilon_g = -2\varkappa > 0$ точки пересечения на прямой $q/\varkappa$ (*1*) отвечают уровням размерного квантования с энергией больше щели. При уменьшении ε_g и смене знака прямая *1* переходит в прямую *2* (пока $a_c = 1/|\varepsilon_g| > a$) и, наконец, в прямую *3* ($a_c < a$). При этом решение с минимальным $|q|$ из чисто мнимого (точка пересечения q_m) переходит в вещественное (точка пересечения q_m').

$$n_\lambda(z)=\hat{\psi}_\lambda^+(z)\,\hat{\psi}_\lambda(z)=\tilde{B}^2\,\frac{\varepsilon+\lambda k}{2\varepsilon}{}_\perp\mathrm{sh}^2[q(a+z)]+\frac{\varepsilon-\lambda k}{2\varepsilon}{}_\perp\mathrm{sh}^2[q(a-z)],\quad (23)$$

где

$$\tilde{B}^2=\frac{\varkappa^2-q^2}{\varkappa-2a(\varkappa^2-q^2)}.\qquad (24)$$

Распределение спина $\Sigma_\lambda(z)$ в соответствии с (12) имеет вид

$$\Sigma_\lambda(z)=\lambda\hat{\psi}_\lambda^+\gamma^0\hat{\psi}_\lambda=\lambda\tilde{B}^2\frac{\varkappa}{\varepsilon}\,1-\frac{\mathrm{ch}\,2qz}{\mathrm{ch}\,2qa}.\qquad (25)$$

Отсюда видно, что распределение плотности спина симметрично с максимумом в центре и обращением в нуль на границах пленки. Плотность же заряда, напротив, сконцентрирована на границах, причем с ростом $k_\perp$ «электронные» состояния с положительной четностью прижимаются к правой границе, а с отрицательной четностью — к левой. Для «дырочных» состояний происходит обратное.

Наличие псевдочетности приводит к определенным правилам отбора для оптических переходов между локализованными состояниями со спектром (16). В отличие от инверсного контакта матричный элемент скорости (для перехода $\varepsilon_\lambda \to \varepsilon'_{\lambda'}$)

$$\mathbf{v}=\nu\langle\hat{\psi}_{\lambda'}\,|\,\gamma^0\boldsymbol{\gamma}\,|\,\hat{\psi}_\lambda\rangle\qquad (26)$$

имеет отличные от нуля компоненты как в плоскости пленки, так и поперек нее:

$$\begin{gathered}v_l=i\lambda\nu(1-\delta_{\lambda\lambda'}),\\ v_{k_\perp}=\lambda\nu\frac{\sqrt{\varkappa^2-q^2}}{|\varepsilon|}\,\delta_{\lambda\lambda'},\\ v_z=i\nu\frac{2(2a\varkappa-1)}{\varkappa-2a(\varkappa^2-q^2)}\sqrt{\varkappa^2-q^2}\,\mathrm{sign}(\varepsilon)\,\delta_{\lambda\lambda'}.\end{gathered}\qquad (27)$$

Отсюда видно, что для света, поляризованного вдоль направления $\mathbf{l}$, разрешенными являются переходы с изменением четности, причем выражение для v_l совпадает с соответствующим выражением для инверсного контакта [11]. Для света, поляризованного в плоскости $(\mathbf{k}_\perp, z)$, разрешены переходы с сохранением четности. В случае инверсного контакта, когда нулевая мода невырождена, такие переходы невозможны. Из (27) видно также, что компоненты $v_{k_\perp}$ и v_z пропорциональны величине $(\varkappa^2-q^2)^{1/2}$, т. е. уменьшаются с ростом толщины пленки (и в пределе $a\to\infty$ обращаются в нуль). Связано это с тем, что волновые функции электронных и дырочных состояний с одинаковой четностью локализованы у противоположных границ пленки [см. (23)]. Используя (27), можно рассчитать частотную зависимость поглощения света с различной поляризацией. Например, коэффициент прохождения света, линейно поляризованного в плоскости пленки, равен

$$R(\omega)=\pi\frac{e^2}{\hbar cn}\left[1+\left(\frac{E_g}{\hbar\omega}\right)^2\right]\Theta(\hbar\omega-E_g),\qquad (28)$$

где $E_g=2\hbar\nu\,(\varkappa^2-q^2)^{1/2}$ — щель в спектре локализованных состояний, n — показатель преломления пленки.

4. Рассмотрим теперь, как модифицируется спектр (16) в однородном магнитном поле $\mathbf{H}$, направленном вдоль оси z. Для этого в гамильтониане $\hat{H}$ (1) оператор импульса $\hat{\mathbf{p}}$ заменим на оператор $\hat{\pi}=\hat{\mathbf{p}}-(e/c)\,\mathbf{A}$, где $\mathbf{A}$ — векторный потенциал, который выберем в калибровке:

$$\mathbf{A}={}^1/_2[\mathbf{H}\times\boldsymbol{\rho}],\qquad (29)$$

где $\rho=(x, y)$. В этом случае гамильтониан приобретает вид

$$\hat{H}_A=[\nu\gamma^0\gamma^3\hat{p}_z+\gamma^0\Delta(z)+\nu\gamma^0(\gamma_+\hat{\pi}_-+\gamma_-\hat{\pi}_+)], \tag{30}$$

где $\gamma_\pm=(\gamma^1\pm i\gamma^2)$, $\hat{\pi}_\pm=(\hat{\pi}_x\pm i\hat{\pi}_y)$. Можно убедиться, что с этим гамильтонианом коммутирует оператор

$$\hat{P}_A=\gamma^5(\boldsymbol{\gamma}\cdot[\mathbf{n}\times\hat{\boldsymbol{\pi}}_\perp])=i\gamma^0\gamma^3(\gamma_+\hat{\pi}_-+\gamma_-\hat{\pi}_+), \tag{31}$$

который является простым обобщением оператора (3) на случай наличия магнитного поля. Собственные функции оператора (31) определяются следующим образом. Используя коммутационные свойства матриц $\gamma_\pm$, получим

$$\hat{P}_A^2=\hat{\pi}_+\hat{\pi}_-+(1+\hat{\Sigma}_3)\frac{\hbar^2}{L^2}, \tag{32}$$

где $\hat{\Sigma}_3$ — оператор проекции спина на ось z, $L^2=\hbar c/\mid e\mid H$ — магнитная длина. Собственными функциями оператора $\hat{\pi}_+\hat{\pi}_-$ являются функции осциллятора Ландау $\Phi_n(x, y)$, причем

$$\pi_+\pi_-\Phi_n(x, y)=2n\frac{\hbar^2}{L^2}\Phi_n(x, y), \quad n=0, 1, 2, \ldots \tag{33}$$

Поскольку в представлении (9) оператор спина $\hat{\Sigma}$ диагонален, компоненты собственного биспинора $\hat{\psi}$ оператора (32), а следовательно, и оператора $\hat{P}_A$ можно представить в виде

$$\hat{\psi}_{1,3}=\Phi_{n-1}(x, y)f_{1,3}(z), \tag{34а}$$

$$\hat{\psi}_{2,4}=\Phi_n(x, y)f_{2,4}(z). \tag{34б}$$

Тогда с учетом того, что

$$\hat{P}_A\hat{\psi}=\frac{\lambda\hbar}{L}\sqrt{2n}\,\hat{\psi}, \tag{35}$$

уравнение Дирака для $\hat{\psi}$ примет следующий вид:

$$\left\{\gamma^0[\nu\gamma^3\hat{p}_z+\Delta(z)]-i\gamma^3\lambda\hbar\nu\frac{\sqrt{2n}}{L}-E\right\}\hat{\psi}=0. \tag{36}$$

Из сравнения этого выражения с (8) следует, что все различие сводится к замене $k_\perp$ на величину $\sqrt{2n}/L$, т. е. в однородном магнитном поле, направленном вдоль оси z, происходит квантование Ландау и спектр (16) приобретает вид

$$\varepsilon=\pm\sqrt{\kappa^2-q^2+2n/L^2}. \tag{37}$$

Спинорная структура волновой функции имеет тот же вид, что и (21), с добавлением орбитальных множителей Φ_{n-1} и Φ_n в соответствии с (34) и заменой $k_\perp$ на $\sqrt{2n}/L$. Угол θ определяется калибровкой векторного потенциала и в случае (29) равен $\pi/2$. При $n=0$ компоненты $\psi_{1,3}^{(0)}=0$, так что нулевые уровни Ландау с энергиями $\varepsilon=\pm\sqrt{\kappa^2-q^2}$ не вырождены. Остальные уровни с $n=0$ остаются двукратно вырожденными по четности $\lambda=\pm1$.

Аналогично (27) можно вычислить матричные элементы переходов между уровнями Ландау. Для света, распространяющегося перпендикулярно магнитному полю и поляризованного вдоль оси z (конфигурация Фойгта), разрешены переходы только между уравнями с одинаковыми индексами n («межзонные» переходы), а сам матричный элемент совпадает с соответствующим выражением (27) для v_z. В конфигурации Фарадея, когда свет распространяется вдоль магнитного поля, имеет смысл говорить о правой и левой его циркулярных поляризациях в плоскости пленки. В этом случае разрешены переходы между уровнями Ландау с номерами n и $n'=n\pm1$, причем для переходов с увеличением номера n активна правая поляризация, а для переходов с уменьшением n — левая. При этом возможны переходы как «межзонные», и так «внутризонные». Выражения для соответствующих матричных элементов $v_{\pm}=(v_x\pm iv_y)/2$ довольно громоздки по сравнению с (27) и мы их не приводим.

5. Спектр поверхностных состояний в пленке и полубесконечном кристалле узкощелевого полупроводника рассматривался ранее [9], где решалось уравнение (2) с постоянной щелью $\Delta(z)=\Delta$ (и $G=0$) с использованием феноменологических граничных условий:

$$\hat{\psi}=-i\hat{A}(\boldsymbol{\gamma}\cdot\mathbf{n})\hat{\psi}. \tag{38}$$

Здесь n — нормаль к поверхности, A — некоторая эрмитова матрица. Заметим, что из этого соотношения следует отсутствие тока через границы раздела. В работе [9] установлено, что матрица $\hat{A}$ определяется единственным вещественным параметром a_0:

$$\hat{A}={}^1/_2\{(a_0+1/a_0)+(a_0-1/a_0)\gamma^0\}. \tag{39}$$

Волновая функция (21) также удовлетворяет условию (38) с единичной матрицей $\hat{A}=\hat{I}$, т. е. при $G(z)=0$ параметр $a_0=1$. Покажем, что возможное отличие a_0 от единицы связано с конечной работой выхода. Действительно, квадрируя уравнение (8), получим

$$\left\{\hat{p}_z^2+k_\perp^2+\kappa^2(z)-[\varepsilon-g(z)]^2+i\frac{\partial}{\partial z}[\gamma^3\kappa(z)-\gamma^0\gamma^3g(z)]\right\}\hat{\psi}=0. \tag{40}$$

Если зависимости $k(z)$ и $q(z)$ определяются одной и той же функцией $f(z)$, а именно

$$\kappa(z)=\kappa_0 f(z),\quad g(z)=g_0 f(z), \tag{41}$$

то матричную часть уравнения (40) можно диагонализовать с помощью канонического (неунитарного) преобразования $\hat{\psi}=\hat{S}\hat{\chi}$, где

$$\hat{S}=\exp\left(\frac{\varphi}{2}\gamma^0\right)=\operatorname{ch}\frac{\varphi}{2}+\gamma^0\operatorname{sh}\frac{\varphi}{2}, \tag{42}$$

а угол φ определяется условием $\operatorname{th}\varphi=g_0/\kappa_0$. Компоненты $\hat{\chi}$ удовлетворяют суперсимметричным уравнениям [5]:

$$\left[\hat{p}_z^2+\omega^2(z)\mp\sigma_z\frac{d\omega}{dz}+k_\perp^2-\tilde{\varepsilon}^2\right]\hat{\chi}_{1,2}=0, \tag{43}$$

где $\tilde{\varepsilon}=\varepsilon\kappa_0/(\kappa_0^2-g_0^2)^{1/2}$, а «суперпотенциал» $\omega(z)$ имеет вид

$$\omega(z)=\sqrt{\kappa_0^2-g_0^2}\,f(z)+\tilde{\varepsilon}(g_0/\kappa_0). \tag{44}$$

Произведя преобразование (42) над линейным уравнением (8), получим также

$$\{\gamma^0[\gamma^3\hat{p}_z+\omega(z)]-i\gamma^3\lambda k_\perp-\tilde{\varepsilon}\}\hat{\chi}(z)=0. \tag{45}$$

Уравнения (43) и (46) по виду совпадают с соответствующими уравнениями (11) и (8) при $G(z)=0$. Кроме того, поскольку оператор $\hat{P}$ (3) коммутирует с $\hat{S}$, $\hat{\chi}$ является собственной функцией $\hat{P}$ с тем же собственным значением λ, что и функция $\hat{\psi}_\lambda$. Поэтому, в частности, для $f(z)$ в виде прямоугольной ямы решение для $\hat{\chi}_\lambda$ с точностью до переобозначений совпадает с (21) и удовлетворяет граничным условиям $\hat{\chi} = -i(\gamma \cdot \mathbf{n})\hat{\chi}$. Отсюда после обратного преобразования $\hat{\chi} = \hat{S}^{-1}\hat{\psi}$ имеем

$$\hat{\psi} = -i\hat{S}(\gamma \cdot \mathbf{n})\hat{S}^{-1}\hat{\psi} = -i\hat{S}^2(\gamma \cdot \mathbf{n})\hat{\psi}, \tag{46}$$

т. е. матрица $\hat{A}$ в (38) совпадает с квадратом оператора (42) и

$$a_0 = \operatorname{ch}\varphi + \operatorname{sh}\varphi = \operatorname{sign}(\kappa_0)\sqrt{\frac{1 - g_0/\kappa_0}{1 + g_0/\kappa_0}}. \tag{47}$$

Видно, что при $g_0=0$ параметр $a_0=\pm 1$ в зависимости от того, инвертированы зоны полупроводниковой пленки или нет. При $g_0 \neq 0$ он может быть по модулю как меньше, так и больше единицы, что зависит от знака g_0/κ_0. Для ступенчатого гетероперехода g_0 представляет собой разность работ выхода из полупроводников. Поэтому при $g_0/\kappa_0 > 0$ разрыв валентной зоны на переходе меньше, чем разрыв зоны проводимости, а при $g_0/\kappa_0 < 0$ наоборот.

Следует отметить, что наличие конечной работы выхода g_0 приводит к появлению приграничных состояний и в обычных, неинвертированных гетеропереходах. Для резких переходов на это, по-видимому, впервые указано в работе [12]. Однако вывод справедлив и для плавных переходов, как это видно из выражений (43) и (44). Действительно, если асимптотики у функции $f(z)$ при $z=\pm\infty$ одинаковы по знаку, но разные по величине (несимметричный гетеропереход без инверсии зон), то имеется конечный интервал энергий ε, в котором соответствующие асимптотики суперпотенциала (44) противоположны по знаку. Это означает наличие нулевой моды в уравнении (43), т. е. локализованных на границе раздела состояний независимо от формы переходного слоя. По энергии эти состояния перекрываются либо с валентной зоной ($g_0 > 0$), либо с зоной проводимости ($g_0 < 0$).

В заключение авторы выражают благодарность Б. А. Волкову и М. М. Мусаханову за полезные обсуждения в процессе выполнения настоящей работы.

Список литературы

[1] Волков Б. А., Панкратов О. А. // Письма ЖЭТФ. 1985. Т. 42. В. 4. С. 145—148.
[2] Nimitz G., Schlicht B., Dornhaus R. Narrow-gap semiconductors. Springer-Tracts in Mod. Phys. Berlin, 1983.
[3] Yuen W. T., Lin W. K., Holmes S. N. // Semicond. Sci. Techn. 1989. V. 4. P. 819—823.
[4] Генденштейн Л. Э., Криве И. В. // УФН. 1985. Т. 146. В. 4. С. 553—590.
[5] Pankratov O. A., Pakhomov S. V., Volkov B. A. // Sol. St. Commun. 1987. V. 61. N 2. P. 93—96.
[6] Панкратов О. А. // Письма ЖЭТФ. 1987. Т. 45. В. 2. С. 82—85.
[7] Панкратов О. А. // Письма ЖЭТФ. 1987. Т. 45. В. 7. С. 317—319.
[8] Pankratov O. A. // Phys. Lett. A. 1987. V. 121. N 7. P. 360—366.
[9] Волков В. А., Пинскер Т. Н. // ФТТ. 1981. Т. 23. В. 6. С. 1756—1759.
[10] Korenman V., Drew H. D. // Phys. Rev. B. 1987. V. 35. N 2. P. 6446—6449.
[11] Agassi D., Korenman V. // Phys. Rev. B. 1988. V. 37. N 17. P. 10095—10106.
[12] Райчев О. Э. // ФТП. 1989. Т. 23. В. 7. С. 1226—1229.

Физический институт им. П. Н. Лебедева
РАН
Москва

Получена 10.07.1991
Принята к печати 21.08.1991