

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР НОСИТЕЛЕЙ В УЗКОЙ КВАНТОВОЙ ЯМЕ В БЕСЩЕЛЕВОМ ПОЛУПРОВОДНИКЕ

Дугаев В. К., Петров П. П.

В последнее время уделяется большое внимание изучению квантовых ям и сверхструктур на основе узкощелевых и бесщелевых полупроводников типа HgTe—HgCdTe или PbSnTe [1-3]. Успехи в технологии изготовления этих систем весьма впечатляющие: толщины могут достигать всего нескольких атомных слоев, а чередоваться могут слои из разнородных материалов.

Однако в теоретическом плане эти системы изучены недостаточно. Так, в сверхструктурах HgTe—CdTe внимание в основном было сконцентрировано на расчете спектра HgTe вблизи точки $k=0$ в периодическом потенциале, создаваемом слоями CdTe [4, 5]. При этом рассматривались состояния, по существу являющиеся трехмерными. Значительно больший интерес представляют двумерные состояния, которые возникают при локализации в квантовых ямах.

Известно, что в узкощелевых и бесщелевых полупроводниках такие состояния могут обладать особенностями. В [6, 7] изучена локализация носителей на гетеропереходе и на сегнетоэлектрической стенке в PbSnTe , при этом спектр связанных состояний может быть линейным (в первом случае) или характеризоваться очень большой массой (во втором). Гетеропереходы различных типов, получаемые при контакте двух полупроводников, описываемых моделью Кейна, рассматривались также в [8]. Для бесщелевого HgTe имеются особенности в образовании связанных состояний вблизи поверхности [9] или в размерноквантованной пленке [10]. Для квантовых ям CdTe—HgTe—CdTe существование поверхностных состояний показано в [11, 12].

В настоящей работе вычислен спектр носителей для бесщелевого полупроводника типа HgTe при наличии очень узкой одномерной квантовой ямы, которая моделируется потенциалом вида

$$V(\mathbf{r}) = V_0 \delta(z), \quad V_0 > 0. \quad (1)$$

Этот потенциал является притягивающим для дырок. Модель (1) оправдана, если соответствующая длина локализации волновой функции много больше размера ямы π , кроме того, возмущение параллельно сдвигает зоны (соответствует сдвигу химического потенциала).¹

Свободные носители описываются гамильтонианом Латтинжера [15]

$$H_0 = \alpha \nabla^2 - \beta (\mathbf{J} \nabla)^2, \quad (2)$$

где \mathbf{J} — матрицы момента $3/2$; параметры α и β связаны с эффективными массами электронов m_e и дырок m_v соотношениями

$$\alpha = (9m_v + m_e)/16m_e m_v, \quad \beta = (m_v + m_e)/4m_e m_v. \quad (3)$$

Законы дисперсии свободных электронов и дырок (рассматриваются только тяжелые дырки, и соответственно все энергии должны быть много меньше $E_0 = E_{\Gamma_8} - E_{\Gamma_6} \approx 0.3$ эВ для HgTe [16]):

$$E_e(\mathbf{k}) = k^2/2m_e, \quad E_v(\mathbf{k}) = -k^2/2m_v, \quad \hbar = 1. \quad (4)$$

Уравнению Шредингера с гамильтонианом $H_0 + V(\mathbf{r})$ удовлетворяют волновые функции вида

$$\psi_{i\pm}^{(\pm)} = \Phi_i(z_\alpha) \exp(ikx) \exp(\pm z_\alpha z), \quad (5)$$

¹ Возможность захвата дырок в квантовых ямах HgTe—CdTe—HgTe связана со знаком величины $E_{\Gamma_8}^{\text{HgTe}} - E_{\Gamma_6}^{\text{CdTe}}$, который в настоящее время не установлен [13, 14]. Поэтому мы не конкретизируем состав внутри ямы.

где

$$z_1 = (k^2 - 2m_0 E)^{1/2}, \quad z_2 = (k^2 + 2m_0 E)^{1/2}, \quad (6)$$

$$\Phi_1(z_1) = \begin{pmatrix} \lambda(-z_1) \\ 1 \\ 1 \\ \lambda(-z_1) \end{pmatrix}, \quad \Phi_2(z_1) = \begin{pmatrix} \lambda(z_1) \\ -1 \\ 1 \\ -\lambda(z_1) \end{pmatrix}, \quad \Phi_1(z_2) = \begin{pmatrix} 1 \\ -\lambda(z_2) \\ -\lambda(z_2) \\ 1 \end{pmatrix},$$

$$\Phi_2(z_2) = \begin{pmatrix} -1 \\ -\lambda(-z_2) \\ \lambda(-z_2) \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (7)$$

$$\lambda(z) = k\sqrt{3}/(k+2z). \quad (8)$$

Согласно (5), направление оси x выбрано вдоль направления движения в плоскости. Запишем волновую функцию, удовлетворяющую требуемым условиям при $z = \pm\infty$, в виде линейной комбинации (5)

$$\psi = \begin{cases} \sum_{i\alpha} A_{i\alpha} \psi_{i\alpha}^-, & z > 0, \\ \sum_{i\alpha} B_{i\alpha} \psi_{i\alpha}^+, & z < 0. \end{cases} \quad (9)$$

Из условия сшивки при $z = 0$ следуют соотношения между коэффициентами $A_{i\alpha}$ и $B_{i\alpha}$

$$\begin{aligned} [1 + \lambda(z_1)\lambda(-z_2)] B_{11} &= A_{11} [1 + \lambda(-z_1)\lambda(-z_2)] + A_{12} [\lambda(-z_2) - \lambda(z_2)], \\ [1 + \lambda(z_1)\lambda(-z_2)] B_{12} &= A_{11} [\lambda(-z_1) - \lambda(z_1)] + A_{12} [1 + \lambda(z_1)\lambda(z_2)], \\ [1 + \lambda(-z_1)\lambda(z_2)] B_{21} &= A_{21} [1 + \lambda(z_1)\lambda(z_2)] + A_{22} [\lambda(-z_2) - \lambda(z_2)], \\ [1 + \lambda(-z_1)\lambda(z_2)] B_{22} &= A_{21} [\lambda(-z_1) - \lambda(z_1)] + A_{22} [1 + \lambda(-z_1)\lambda(-z_2)]. \end{aligned} \quad (10)$$

Подставляя (10) в (9) и интегрируя уравнение Шредингера по малой окрестности вблизи точки $z = 0$, получим систему четырех уравнений для коэффициента $A_{i\alpha}$, которая распадается на две независимые системы для A_{11} , A_{12} и A_{21} , A_{22} . Условие равенства нулю детерминанта первой системы, которое обеспечивает A_{11} , $A_{12} \neq 0$, может быть преобразовано к следующему виду:

$$\begin{aligned} 3k^2 [2x_1(x_2^2 - k^2) + m_0 V_0 (2k^2 + kx_1 - kx_2 - 2x_1x_2)] [2x_2(x_2^2 - k^2) + m_0 V_0 (2k^2 + kx_1 - \\ - kx_2 - 2x_1x_2)] - [2x_2(2x_1 + k)(x_2^2 - k^2) + m_0 V_0 (2x_2 + k)(2k^2 + kx_1 - kx_2 - 2x_1x_2)] \times \\ \times [2x_1(2x_2 - k)(x_2^2 - k^2) + m_0 V_0 (2x_1 - k)(2k^2 + kx_1 - kx_2 - 2x_1x_2)] = 0. \end{aligned} \quad (11)$$

Соответственно A_{21} , $A_{22} \neq 0$ при выполнении уравнения, аналогичного (11), с заменой $k \rightarrow -k$ [обозначим его (11')]. Уравнения (6), (11) и (11') определяют энергетический спектр носителей. В точке $k = 0$ имеет место вырождение, которое снимается при $k \neq 0$. Согласно (6), связанные состояния могут существовать лишь при $(-k^2/2m_0) < E < (k^2/2m_0)$, поэтому в окрестности точки $k = 0$ состояния квазисвязанные. Однако, ввиду того что в соединениях рассматриваемого типа $(m_c/m_v) \leq 0.03$ [16], эта окрестность оказывается очень малой.

Уравнения (11) и (11') существенно упрощаются в пределе $(m_c/m_v) \rightarrow 0$. В этом случае они приводятся к виду (запишем их для $k > 0$ и полагаем $x \equiv x_2$)

$$k [2(k+x) - 3m_0 V_0] [2x(k+x) - 3m_0 V_0 k] + [2x(k+x) - m_0 V_0 (k+2x)] \times \\ \times [2(k-2x)(k+x) - 3m_0 V_0 k] = 0, \quad (12)$$

$$3k [2(k+x) - m_0 V_0] [-2x(k+x) + m_0 V_0 k] + [2x(k+x) + m_0 V_0 (k-2x)] \times \\ \times [2(k+2x)(k+x) - 3m_0 V_0 k] = 0. \quad (13)$$

Удобно перейти к безразмерным переменным $x = k/m_0 V_0$, $y = x/m_0 V_0$, $\epsilon = 2E/m_0 V_0$. При этом из (12) и (13) следуют уравнения для двух ветвей энергетического спектра

$$4y^4 - 4y^3(1-x) - 4y^2x(1+x) + yx(3+4x-4x^2) - x^2(3-4x) = 0, \quad (14)$$

$$4y^4 - 4y^3(1+x) + 4y^2x(1-x) - yx(3-4x-4x^2) - x^2(3+4x) = 0. \quad (15)$$

При $x \ll 1$ их решения

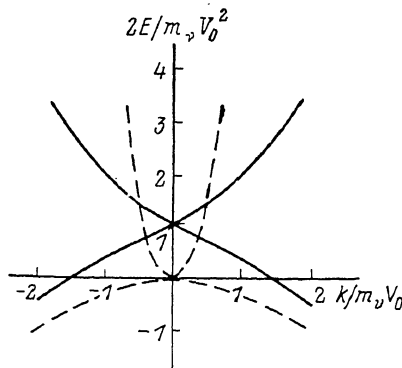
$$y_{1,2}(x) \approx 1 \pm 3x/4, \quad (16)$$

что дает

$$E_{1,2}(k) = (m_v V_0^2/2) \pm (3kV_0/4). \quad (17)$$

Таким образом, спектр связанных состояний вблизи точки $k=0$ оказывается линейным, скорость частицы пропорциональна мощности возмущающего потенциала V_0 . На рисунке показан спектр, полученный путем численного решения уравнений (14) и (15).

В сверхрешетках HgTe—HgCdTe экспериментально наблюдалось [17] увеличение подвижности дырок на 2 порядка по сравнению с обычными трехмерными образцами,



Энергетический спектр связанных состояний.

Штриховой линией показан спектр в объемном кристалле,

что может быть связано с особенностями энергетического спектра в таких системах — возникновением линейных участков в спектре двумерных состояний.

Л и т е р а т у р а

- [1] Herman M. A., Pessa M. — J. Appl. Phys., 1985, v. 57, N 8, p. 2671—2694.
- [2] Bauer G. — Surf. Sci., 1986, v. 168, N 3, p. 462—472.
- [3] Faurie J. P., Reno J., Souli, Boukerche M. — Surf. Sci., 1986, v. 174, N 1-3, p. 534—535.
- [4] Schulman J. N., Chang Y. C. — Surf. Sci., 1986, v. 174, N 1-3, p. 536—540.
- [5] Guldner Y., Bastard G., Voos M. — J. Appl. Phys., 1985, v. 57, N 4, p. 1403—1405.
- [6] Волков Б. А., Панкратов О. А. Безмассовые двумерные электроны в инверсионном контакте. — Письма ЖЭТФ, 1985, т. 42, в. 4, с. 145—148.
- [7] Волков Б. А., Панкратов О. А. Тяжелые фермионы в суперсимметричной сегнетоэлектрической доменной стенке. — Письма ЖЭТФ, 1986, т. 43, в. 2, с. 99—101.
- [8] Сурис Р. А. Пограничные состояния в гетеропереходах. — ФТП, 1986, т. 20, в. 11, с. 2008—2015.
- [9] Дьяконов М. И., Хаецкий А. В. Поверхностные состояния в бесщелевых полупроводниках. — Письма ЖЭТФ, 1981, в. 33, в. 2, с. 115—118.
- [10] Дьяконов М. И., Хаецкий А. В. Размерное квантование дырок в полупроводниках со сложной валентной зоной и носителей в бесщелевых полупроводниках. — ЖЭТФ, 1982, т. 82, в. 5, с. 1584—1590.
- [11] Chang Y. C., Schulman J. N., Bastard G., Guldner Y., Voos M. — Phys. Rev., 1985, v. B31, N 4, p. 2557—2560.
- [12] Lin-Lin Y. R., Sham L. J. — Phys. Rev., 1985, v. B32, N 8, p. 5561—5563.
- [13] Wu G. L., McGill T. C. — J. Appl. Phys., 1985, v. 58, N 10, p. 3914—3916.
- [14] Schulman J. N., Chang Y. C. — Phys. Rev., 1986, v. B33, N 4, p. 2594—2601.
- [15] Бир Г. Л., Пикус Г. Е. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М., 1978. 584 с.
- [16] Dornhaus R., Nimtz G. — In: Narrow gap semiconductors. Berlin, 1985, p. 119—300.
- [17] Woo K. C., Rafol S., Faurie J. P. — Phys. Rev., 1986, v. B34, N 8, p. 5996—5999.

Львовский политехнический институт

Получено 5.06.1987
Принято к печати 21.08.1987