ПОГРАНИЧНЫЕ СОСТОЯНИЯ В ЗОНЕ ПРОВОДИМОСТИ РЕЗКОГО ГЕТЕРОПЕРЕХОДА

Кисин М. В.

Найдены условия возникновения двумерных пограничных состояний в зоне проводимости резкого гетероперехода, содержащего узкощелевой полупроводник. Ограничения на ширину запрещенной зоны узкощелевой компоненты гетеропары сильнее для полупроводников, описываемых моделью Кейна, чем для халькогенидов свинца с дираковским зонным спектром.

Пограничные состояния (ПС) в гетеропереходах (ГП) представляют собой новый тип электронной двумерной системы. ПС предсказаны в запрещенной зоне инверсного ГП [1, 2], а также в валентной зоне ГП между кейновскими полупроводниками с нормальной зонной структурой [3, 4]. Последние состояния, однако, являются резонансными, поскольку попадают на фон зоны тяжелых дырок узкозонного материала. Это затрудняет их экспериментальное исследование. В настоящей работе получены условия возникновения ПС в зоне проводимости резких ГП, содержащих узкощелевой полупроводник.

Наличие резкой гетерограницы вносит сильное возмущение в энергетический спектр носителей заряда. Поскольку разрывы зон Δ_c, Δ_v сравнимы с шириной запрещенной зоны узкозонного материала ε_g, задачу необходимо решать, используя многозонную модель, например модель Диммока [5] для халькогенидов свинца или модель Кейна [6] для полупроводников со структурой цинковой обманки. Упростим задачу, ограничившись в дальнейшем сферическим приближением. Гамильтониан Диммока сводится при этом к известному гамильтониану Дирака. Более того, если проекция импульса $k_z=0$, то в базисе $\{L^-\uparrow; L^-\downarrow; L^+\downarrow; L^+\uparrow\}$ матрица гамильтониана распадается на две независимые субматрицы $H_\mu^{(D)}$ размерности 2×2, связывающие первое с третьим ($\mu=-1$) и второе с четвертым ($\mu=+1$) базисные состояния:

$$H_\mu^{(D)}=\begin{bmatrix}\varepsilon_g & k_\mu\\ k_{-\mu} & 0\end{bmatrix},\quad k_\mu=k_x+i\mu k_y. \tag{1}$$

Здесь и далее отсчет энергии ведется от потолка валентной зоны узкощелевого полупроводника, а все величины размерности энергии переведены в размерность волнового вектора делением на межзонный матричный элемент P (в модели Кейна — на $\sqrt{2/3}\,P$), который полагается одинаковым в контактирующих материалах. К аналогичному виду можно привести и кейновский гамильтониан размерности 8×8. Первая строка субматрицы $H_\mu^{(K)}$ размерности 4×4 будет иметь вид ($k_z=0$)

$$\left[\varepsilon_g,\ \frac{\sqrt{3}}{2}k_\mu,\ \frac{1}{2}k_{-\mu},\ \frac{1}{\sqrt{2}}k_{-\mu}\right]. \tag{2}$$

Первый столбец, как и в (1), получается эрмитовым сопряжением, при этом $k_\mu^+=k_{-\mu}$. Элемент гамильтониана $H_{\mu 44}^{(K)}=-\Delta\equiv-\Delta_{so}/\sqrt{2/3}\,P$ связан со спин-орбитальным расщеплением валентной зоны Δ_{so}. Все остальные матричные элементы будем считать равными нулю, пренебрегая тем самым дисперсией тяжелых дырок. Последнее упрощение оправдано, поскольку нас интересуют ПС в зоне проводимости.

Свойства симметрии системы позволяют понизить размерность уравнения Шредингера, ограничиваясь решениями только для одной субматрицы гамильтониана. Пусть ось y направлена вдоль вектора K. Волновая функция $\Psi_\mu = \psi_\mu f(x) \exp(iKy)$, являющаяся решением уравнения Шредингера $H_\mu \Psi = \varepsilon\Psi$, имеет следующую матричную структуру (в фигурных скобках перечислены компоненты вектора-столбца $\psi_{\mu i}$):

$$\psi_\mu^{(D)} = \{\varepsilon;\ k_{-\mu}\}, \tag{3а}$$

$$\psi_\mu^{(K)} = \left\{\varepsilon;\ \sqrt{3}\, k_{-\mu};\ \frac{1}{2} k_{-\mu};\ \frac{1}{\sqrt{2}} k_\mu \frac{\varepsilon}{\varepsilon + \Delta}\right\}. \tag{3б}$$

Нетрудно убедиться в том, что $\Psi_{\mu,K}$ и $\Psi_{-\mu,-K}$ связаны оператором обращения времени T и образуют Крамерсов дублет. Поскольку изменение знака K должно сопровождаться изменением μ, для классификации ветвей спектра ПС удобнее использовать квантовое число, аналогичное спиральности, $\mu_* = \mu \operatorname{sign} K$. Далее пусть $K > 0$. Поворачивая систему координат на 180° вокруг оси z, получим

$$C_2^{(z)} T \Psi_{\mu, K}(x, y) = \Psi_{-\mu, K}(-x, y). \tag{4}$$

Последнее означает, что если на некотором ГП существует состояние Ψ_μ, то на зеркально отраженном переходе должно существовать вырожденное с ним по энергии состояние $\Psi_{-\mu}$ с тем же двумерным волновым вектором. Суперпозиция таких состояний формирует первый уровень размерного квантования в двойной гетероструктуре [7].

Рассмотрим резкий ГП, в котором узкощелевой полупроводник занимает полупространство $x > 0$. Интегрирование уравнения Шредингера через гетерограницу приводит к требованию непрерывности следующих величин:

$$\psi_{\mu 1},\quad \psi_{\mu 2} \tag{5а}$$

в модели Диммока,

$$\psi_{\mu 1},\quad \sqrt{3}\,\psi_{\mu 2} + \psi_{\mu 3} + \sqrt{2}\,\psi_{\mu 4} \tag{5б}$$

в модели Кейна. Полученные условия удовлетворяют также требованию непрерывности x-компоненты потока вероятности.

Исследуем спектр ПС, пренебрегая эффектами, связанными с объемным зарядом и электрон-электронным взаимодействием. Влияние нерезкости гетерограницы может быть учтено, как в работе [4]. Существование ПС в рассматриваемых моделях предполагает экспоненциальный спад волновой функции по обе стороны гетерограницы:

$$f(x) = \begin{cases} C_+ \exp(-qx), & x > 0, \\ C_- \exp(Qx), & x < 0. \end{cases} \tag{6}$$

Условия (5а), (5б) с учетом (3а), (3б) и (6) определяют спектр ПС.

В пределе сильного спин-орбитального взаимодействия в модели Кейна и в модели Дирака эти условия записываются сходным образом:

$$C_- \begin{pmatrix} E \\ -i\beta Q - i\mu K \end{pmatrix} = C_+ \begin{pmatrix} \varepsilon \\ i\beta q - i\mu K \end{pmatrix},$$

или

$$\beta\varepsilon (q + Q) + \Delta_v (\beta q - \mu K) = 0, \tag{7}$$

где

$$Q^2 = K^2 + E(E_g - E),\quad q^2 = K^2 + \varepsilon(\varepsilon_g - \varepsilon),\quad \beta^{(D)} = 1,$$
$$\beta^{(K)} = 2,\quad E = \varepsilon + \Delta_v,\quad E_g = \varepsilon_g + \Delta_v + \Delta_c. \tag{8}$$

Анализ уравнений (7), (8) несложен. Его удобно начать с предельного случая $\varepsilon_g = 0$, допускающего простое решение и позволяющего получить наглядную классификацию ветвей спектра ПС. В модели Дирака (рис. 1) существует одна невырожденная ветвь. При $\Delta_v > \Delta_c$ и $\mu_s=1$ ПС находятся в зоне проводимости. При $\Delta_c > \Delta_v$ и $\mu_s=-1$ ПС существуют только в валентной зоне. Спектр ПС при малых K линейный:

$$\varepsilon^2 = K^2 - q^2, \quad q = K\,|\Delta_c - \Delta_v|/E_g. \tag{9}$$

При $\Delta_c \to \Delta_v$ пограничные состояния смыкаются с объемными состояниями узкощелевого полупроводника ($q \to 0$). В области больших K спектр ПС ограничен. При

$$K_2 = \frac{E_g\sqrt{\Delta_v\Delta_c}}{|\Delta_c - \Delta_v|}, \quad \varepsilon_2 = \frac{2\Delta_v\Delta_c}{|\Delta_c - \Delta_v|} \tag{10}$$

происходит делокализация ПС путем смыкания с объемным спектром широкозонного полупроводника ($Q \to 0$). Отметим, что $\varepsilon_2 > \Delta_c$.

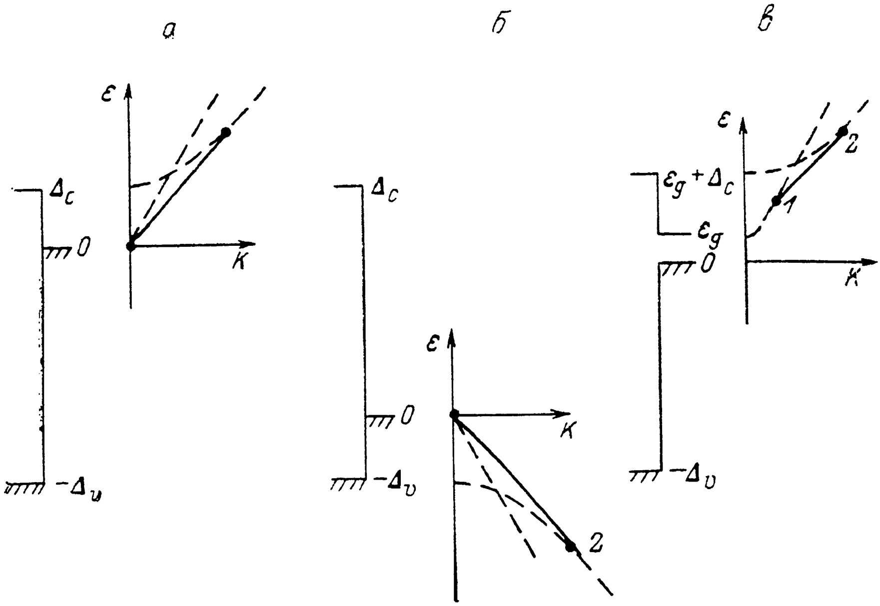

Рис. 1. Пограничные состояния в модели Дирака.
a, $б$ — $\varepsilon_g = 0$, $в$ — $\varepsilon_g > 0$.

В модели Кейна при $\varepsilon_g=0$ и $\Delta_{so} \to \infty$ имеется три ветви ПС (рис. 2). Одна из них (с $\mu_s=1$) при $\Delta_v > \Delta_c$ лежит в зоне проводимости и начинается с $K=0$, если $\Delta_v > 4\Delta_c$. Зона ПС при этом лежит ниже объемных состояний с тем же импульсом. При $\Delta_v > \Delta_c > \Delta_v/4$ ветвь ПС отщепляется от зоны проводимости узкозонного полупроводника в точке

$$K_{1'} = \varepsilon_{1'} = \Delta_v \frac{\Delta_c - \Delta_v/4}{\Delta_c - \Delta_v}, \quad q = 0 \tag{11}$$

и смыкается с зоной проводимости широкозонного полупроводника ($Q=0$) при

$$K_2 = \sqrt{6}\,E_g\frac{\sqrt{\gamma - 1}}{5 - 3\gamma}, \quad \varepsilon_2 = \frac{2E_g}{5 - 3\gamma}, \quad \gamma = \sqrt{1 + \left(\frac{4\Delta_c}{3\Delta_v}\right)^2}. \tag{12}$$

При $\Delta_c > \Delta_v$ ветвь ПС переходит в валентную зону с изменением знака μ_s (рис. 2, $в$).

Учет конечной величины ε_g приводит к некоторым изменениям в картине спектра. Ветви ПС с $\mu_s=1$ в зоне проводимости и с $\mu_s=-1$ в валентной зоне теперь всегда берут начало при конечных энергиях ε_1, отщепляясь от объемного спектра легких частиц узкозонного полупроводника. В модели Дирака

$$\varepsilon_1^{(D)} = \frac{\varepsilon_g \Delta_v}{\Delta_v - \Delta_c}. \tag{13}$$

В модели Кейна

$$\varepsilon_1^{(K)} = \frac{\Delta_v}{2(\Delta_c - \Delta_v)} \left\{ \left(\frac{\Delta_v}{4} - \Delta_c - \varepsilon_g \right) \pm \left[\left(\frac{\Delta_v}{4} - \Delta_c - \varepsilon_g \right)^2 + \varepsilon_g (\Delta_v - \Delta_c) \right]^{1/2} \right\}. \tag{14}$$

Знак плюс относится к точкам $1'$ (рис. 2), которые находились при ненулевых энергиях (11) и в случае $\varepsilon_g = 0$.

Из последних выражений можно найти условия возникновения ПС в области разрыва зоны проводимости $\varepsilon_1 \leqslant \varepsilon_g + \Delta_c$. При выполнении этого условия ПС

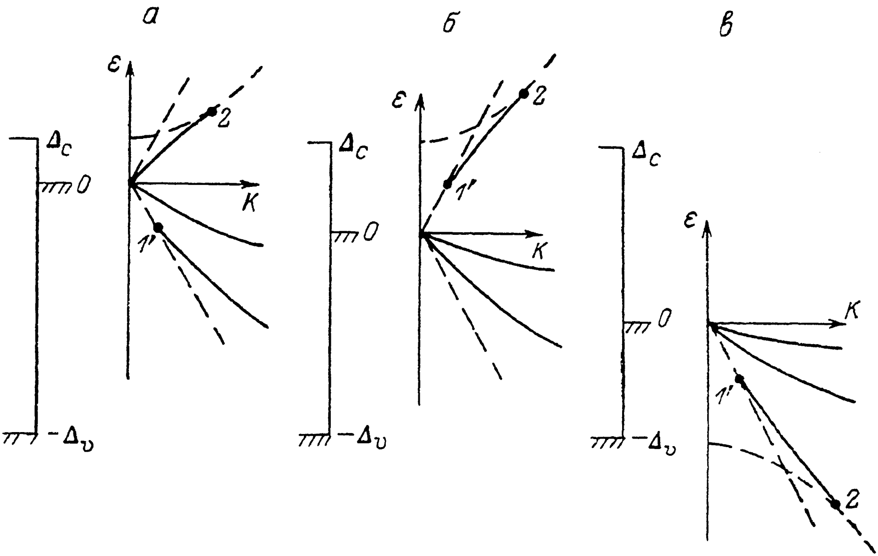

Рис. 2. Пограничные состояния в модели Кейна ($\varepsilon_g = 0$).
$а - \Delta_c < \Delta_v/4$, $б - \Delta_v > \Delta_c > \Delta_c/4$, $в - \Delta_c > \Delta_v$.

могут вносить свой вклад в электронные свойства гетероперехода. Например, участие невырожденных состояний в токопереносе вдоль границы должно приводить к спиновой поляризации электронной подсистемы. Подставляя (13) в (14), получим условия

$$\varepsilon_g + \Delta_c \leqslant \Delta_v \tag{15а}$$

в модели Дирака,

$$\varepsilon_g + \Delta_c \leqslant \Delta_v/2 \tag{15б}$$

в модели Кейна.

Из известных в литературе гетеропар наибольший интерес с точки зрения критерия (15а), (15б) представляет пара CdTe—InSb, где ожидается значение $\Delta_v \sim 1$ эВ [8]. При этом, однако, величина Δ_v становится сравнимой со спин-орбитальным расщеплением Δ_{so}, и требуется более полный анализ, включающий спин-отщепленную зону. Из (3б) и (5а), (5б) нетрудно получить дисперсионное уравнение ПС в модели Кейна с конечной величиной Δ_{so}. Не будем приводить это громоздкое выражение, отметим лишь, что с уменьшением Δ_{so} условия возникновения ПС в зоне проводимости становятся более жесткими. Это достаточно очевидно, так как полученные нами ветви спектра ПС невырождены, т. е. сильно расщеплены по спину, а при $\Delta_{so} = 0$ дисперсионное уравнение ПС в модели Кейна имеет решения только в валентной зоне [3]. В частности, для гетеропары CdTe—InSb расчет по полному дисперсионному уравнению с $\Delta_{so}=0.8$ эВ не дает ПС в зоне проводимости. По-видимому, в настоящее время наиболее реальными объектами для изучения ПС являются ГП на основе халькогенидов свинца или сплавов Bi—Sb. В них в силу зеркальной симметрии спектра ПС существуют либо в зоне проводимости (15а), (15б), либо при $\varepsilon_g+\Delta_v \leqslant \Delta_c$ в валентной зоне. Отметим, что сильная зависимость спектра ПС от соотношения разрывов зон на гетерогранице дает возможность использовать свойства ПС при определении величин $\Delta_{c,v}$.

Литература

[1] Волков Б. А., Панкратов О. А. // Письма ЖЭТФ. 1985. Т. 42. В. 4. С. 145—148.
[2] Chang Y. C., Schulman J. N., Bastard G., Guldner Y., Voos M. // Phys. Rev. B. 1985. V. 31. N 4. P. 2557—2560.
[3] Сурис Р. А. // ФТП. 1986. Т. 20. В. 11. С. 2008—2015.
[4] Сокольский А. В., Сурис Р. А. // ФТП. 1987. Т. 21. В. 5. С. 866—870.
[5] Dimmok J. O. // J. Phys. Chem. Sol. 1971. V. 32 (Suppl.). N 1. P. 319—330.
[6] Kane E. O. // J. Phys. Chem. Sol. 1957. V. 1. N 4. P. 249—261.
[7] Кисин М. В., Петросян В. И. // ФТП. 1988. Т. 22. В. 5. С. 829—833.
[8] Van de Welle C., Martin R. M. // J. Vac. Sci. Techn. 1987. V. B5. N 4. P. 1225—1228.

Институт радиотехники
и электроники АН СССР
Саратовский филиал

Получена 5.07.1988
Принята к печати 21.09.1988