

К ВОПРОСУ О ПОГРАНИЧНЫХ СОСТОЯНИЯХ В РЕЗКИХ ГЕТЕРОПЕРЕХОДАХ

Райчев О. Э.

На основании кейновской и дираковской моделей зонной структуры рассмотрены пограничные состояния, возникающие вблизи резких полупроводниковых гетеропереходов. Обнаружена еще одна ветвь пограничных состояний в дополнение к уже описанным в литературе. Если в гетеропереходе преобладает разрыв по зоне проводимости, то энергии этой ветви лежат в пределах валентных зон полупроводников, образующих гетеропереход, а если преобладает разрыв по валентной зоне, то в пределах зон проводимости.

Известно, что вблизи полупроводниковых гетеропереходов (ГП) возникают пограничные состояния (ПС), характеризующиеся волновыми функциями, затухающими по обе стороны гетероперехода. Если один из полупроводников, образующих ГП, обладает инверсной зонной структурой (инверсные ГП), то энергии ПС могут попадать в область запрещенных энергий однородных полупроводников. Если же ГП образован полупроводниками с нормальной зонной структурой, то энергии ПС лежат в разрешенной области.

Спектры ПС в ГП и квантовых ямах исследовались как советскими [1-3], так и зарубежными [4-7] авторами. В большинстве работ внимание уделялось ПС в инверсных ГП. Наиболее последовательный анализ спектров ПС в резких ГП (в том числе и инверсных) был выполнен Сурисом [2] на основе кейновской модели зонной структуры. В настоящей работе показано, однако, что спектр ПС в резких ГП, описываемых на основе модели Кейна, является более богатым, чем спектр, полученный в [2]: имеется еще одна ветвь ПС, возникающая в ГП с несимметричными разрывами энергетических зон. Рассмотрены также ГП, описываемые на основе модели Дирака, и показано, что в этих ГП пограничные состояния возникают не только при наличии инверсии зон одного из полупроводников, образующих ГП, но и при отсутствии такой инверсии.

1. Рассмотрим ГП, образованный полупроводниками, зонная структура которых описывается моделью Кейна. Поскольку описанная нами далее ветвь ПС имеется лишь при наличии спин-орбитального взаимодействия, мы не будем рассматривать случай малого спин-орбитального взаимодействия, достаточно подробно разобранный в [2], а ограничимся ситуацией, когда это взаимодействие велико. Тогда спектр ПС определяется дисперсионным уравнением (см. также [2])

$$\frac{\gamma_B \pm ak}{\varepsilon_A + \varepsilon - V_p} = \frac{\gamma_A \pm ak}{\varepsilon_A + \varepsilon}, \quad (1)$$

где $\alpha = 1/2$, $\gamma_A = \sqrt{k^2 - \frac{3}{2P^2}(\varepsilon_A + \varepsilon)\varepsilon}$ и $\gamma_B = \sqrt{k^2 - \frac{3}{2P^2}(\varepsilon_A + \varepsilon - V_p)(\varepsilon - V_s)}$ — обратные длины локализации ПС по левую (материал А) и правую (материал В) стороны ГП, P — кейновский параметр, который считаем одинаковым для полупроводников А и В, k — продольный волновой вектор, ε_A — ширина запрещенной зоны в материале А, а V_s и V_p — разрывы по зоне проводимости и по валентной зоне соответственно. Энергия ε отсчитывается от дна зоны проводимости в материале А. Анализируя (1), получаем спектр ПС, изображенный для случаев $V_s > 0$, $V_p < 0$ на рис. 1, а, б, где, кроме описанных в работе [2]

ветвей ПС 1, 2, имеется еще одна ветвь. ПС 3, которая в точке

$$\epsilon_1 = \frac{1}{2(V_s + V_p)} \left[-V_p \left(\epsilon_A - \frac{V_p}{4} \right) - V_s (2\epsilon_A - V_p) + \right. \\ \left. + V_p \sqrt{\left(\epsilon_A - \frac{V_p}{4} \right)^2 + V_s \left(\epsilon_A + \frac{V_p}{2} + V_s \right)} \right] \quad (2)$$

ответвляется от спектра электронов в однородном полупроводнике А, а в точке

$$\epsilon_2 = \frac{1}{2(V_s + V_p)} \left[-V_p \left(\epsilon_A - \frac{3V_p}{4} \right) - 2V_s (\epsilon_A - V_p) + \right. \\ \left. + V_p \sqrt{\left(\epsilon_A - \frac{3V_p}{4} \right)^2 + V_s (\epsilon_A + V_s)} \right] \quad (3)$$

ответвляется от спектра электронов в однородном полупроводнике В. В обеих

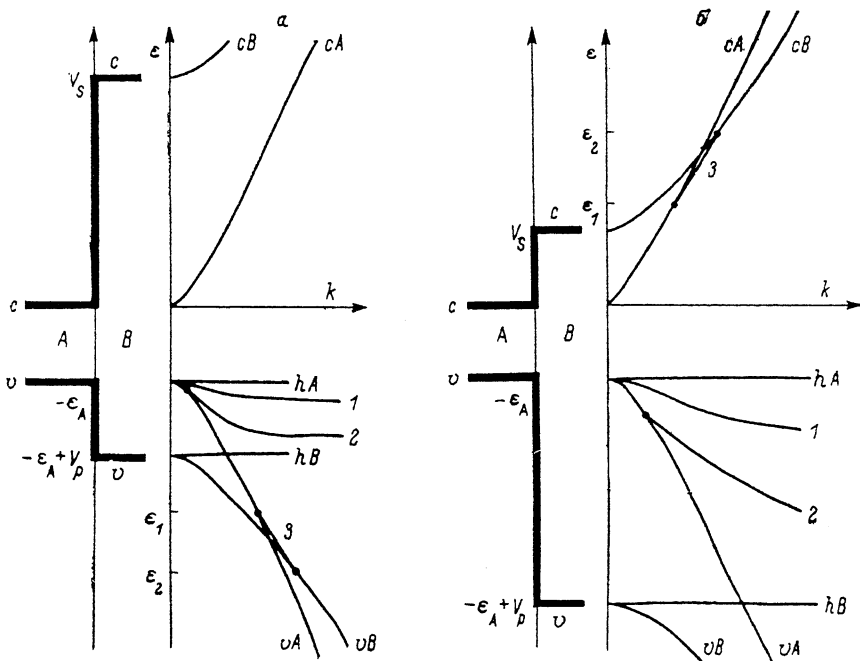


Рис. 1. Спектр пограничных состояний в ГП, описываемых на основе модели Кейна. сА — спектр электронов в полупроводнике А, вА — спектр легких дырок в А; сВ, вВ — соответствующие спектры в полупроводнике В; hА, hВ — спектры тяжелых дырок; 1—3 — ветви ПС. Слева показан ход красной ветви вблизи гетероперехода. а — $|V_s| < |V_p|$, ветвь ПС 3 лежит в валентной зоне; б — $|V_p| > |V_s|$, ветвь ПС 3 лежит в зоне проводимости.

точках имеет место соприкосновение спектра ПС с электронными спектрами однородных полупроводников. Описываемая ветвь ПС существует в интервале энергий между ϵ_1 и ϵ_2 . В случае, когда разрывы зон симметричны $V_p = -V_s$, эта ветвь исчезает. Отметим, что дисперсионное уравнение (1) анализировалось в [2] как раз для этой симметричной ситуации, вследствие чего указанная ветвь не была обнаружена.

Описываемая ветвь ПС существует в ГП с противоположными по знаку разрывами зон $V_s V_p < 0$, т. е. в гетероструктурах типа I. При этом, если доминирует разрыв по зоне проводимости $|V_s| > |V_p|$, ПС лежит в пределах валентных зон однородных полупроводников (рис. 1, а), а при $|V_s| < |V_p|$ — в пределах зон проводимости (рис. 1, б). Спектр этой ветви можно найти в явном виде, когда разрыв по зоне проводимости мал [$|V_s| \ll \epsilon_A$, $|V_p|$]:

$$\epsilon(k) = \frac{P^2 k^2 (2\epsilon_A - V_p)}{2\epsilon_A (\epsilon_A - V_p)} + \frac{V_s \epsilon_A}{V_p} + \sqrt{-\frac{2}{3} P^2 k^2 \left[\frac{P^2 k^2}{2\epsilon_A (\epsilon_A - V_p)} + \frac{V_s}{V_p} \right]}. \quad (4)$$

ПС существует в интервале энергий между

$$\varepsilon_1 = -\frac{\varepsilon_A V_s (\varepsilon_A - V_p)}{V_p \left(\varepsilon_A - \frac{V_p}{4}\right)} \quad \text{и} \quad \varepsilon_2 = -\frac{V_s \left(\varepsilon_A - \frac{3}{2} V_p\right) \left(\varepsilon_A - \frac{V_p}{2}\right)}{V_p \left(\varepsilon_A - \frac{3}{4} V_p\right)}$$

Этим энергиям соответствуют волновые векторы

$$k_1^2 = -\frac{3V_s \varepsilon_A^2 (\varepsilon_A - V_p)}{2P^2 V_p \left(\varepsilon_A - \frac{V_p}{4}\right)} \quad \text{и} \quad k_2^2 = -\frac{3\varepsilon_A V_s (\varepsilon_A - V_p)^2}{2P^2 V_p \left(\varepsilon_A - \frac{3}{4} V_p\right)}$$

Отметим, что ветвь ПС, подобная описанной здесь, может существовать и в инверсных ГП, причем при $V_p \rightarrow -V_s$ она переходит в ветвь, характеризующуюся при $k \rightarrow \infty$ постоянной длиной локализации [2].

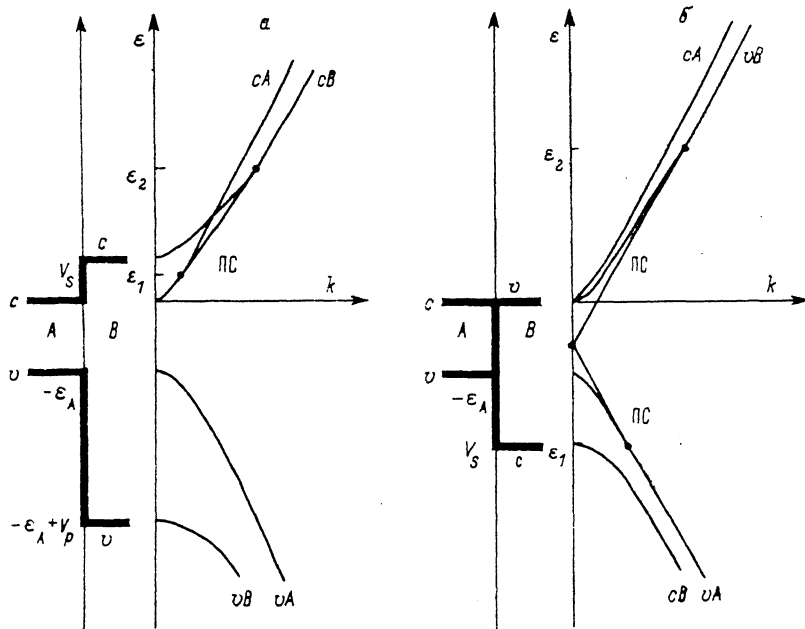


Рис. 2. Спектр пограничных состояний в ГП, описываемых на основе модели Дирака. ПС — ветви пограничных состояний. Остальные обозначения те же, что и на рис. 1. а — неинверсный ГП, случай $|V_p| > |V_s|$; б — инверсный ГП.

2. Рассмотрим теперь ГП, образованный твердыми растворами типа $Pb_{1-x}Sn_xTe$ или $Pb_{1-x}Sn_xSe$, зонная структура которых приближенно может быть описана эллипсоидальной моделью Дирака. Применяя эту модель, ограничимся случаем ГП, нормального к кристаллографическому направлению $\langle 111 \rangle$. Тогда дисперсионное уравнение для ПС имеет вид (1), где теперь

$$\alpha = \frac{P_{\perp}}{P_{\parallel}}, \quad \gamma_A = \sqrt{\alpha^2 k^2 - \frac{1}{P_{\perp}^2} (\varepsilon_A + \varepsilon) \varepsilon}, \quad \gamma_B = \sqrt{\alpha^2 k^2 - \frac{1}{P_{\perp}^2} (\varepsilon_A + \varepsilon - V_p) (\varepsilon - V_s)}$$

P_{\parallel} и P_{\perp} — продольный и поперечный параметры. Спектр ПС можно найти в явном виде:

$$\varepsilon(k) = \frac{1}{V_p - V_s} [V_s \varepsilon_A \pm 2P_{\perp} k \sqrt{-V_p V_s}]. \quad (5)$$

Пограничные состояния существуют только при $V_s V_p < 0$ в интервале энергий между ε_1 и ε_2 , причем

$$\varepsilon_1 = -\frac{\varepsilon_A V_s}{V_s + V_p}, \quad \varepsilon_2 = -\frac{V_s (\varepsilon_A - 2V_p)}{V_s + V_p}. \quad (6)$$

Этим энергиям соответствуют значения волновых векторов

$$k_1^2 = -\frac{V_s V_p \varepsilon_A^2}{P_1^2 (V_s + V_p)^2}, \quad k_2^2 = -\frac{V_s V_p (\varepsilon_A + V_s - V_p)^2}{P_1^2 (V_s + V_p)^2}. \quad (6a)$$

В этих точках спектр ПС касается электронных спектров однородных полупроводников A и B . Спектр (5) был впервые получен в работе [6], авторы которой рассматривали инверсные ГП. При этом ПС представляют собой две безмассовые ветви, начинающиеся при $k=0$. Если $V_p = -V_s$, то ПС существует при всех ε и k [1], но если разрывы зон несимметричны, то область существования ПС ограничена энергиями ε_1 и ε_2 , как показано на рис. 2, б. Здесь мы отметим, что ПС, описываемые уравнением (5), имеют место не только в инверсных, но и в нормальных ГП (рис. 2, а). Если $|V_s| > |V_p|$, ПС лежит в пределах валентных зон, если же $|V_s| < |V_p|$ — в пределах зон проводимости. При $V_p = -V_s$ ПС исчезает. Таким образом, ПС в неинверсном ГП, описываемом на основе модели Дирака, ведет себя подобно отмеченной выше ветви, возникающей в ГП, описываемых на основе модели Кейна.

Результаты принципиально не меняются, если учесть изменение параметров P или $P_{||}$, P_{\perp} на гетеропереходе. Можно показать, что в случаях, когда имеет место пересечение электронных спектров однородных полупроводников, образующих ГП, наличие спин-орбитального взаимодействия приводит к «выпадению» ПС в окрестности точки пересечения спектров, подобно тому как показано на рис. 1, а, б и 2, а.

Полезно оценить полную концентрацию n_s электронов, которые могут быть связаны на ГП в качестве ПС: $n_s = |k_2^2 - k_1^2| / 4\pi$. Для ГП на основе $Pb_{1-x}Sn_xTe$, используя $P_{\perp} \approx 7.3 \cdot 10^{-20}$ эрг·см [8] и принимая для оценок $\varepsilon_A \approx V_s \approx 0.1$ эВ, $V_p \approx -3 V_s$, получим $n_s \approx 10^{13}$ см $^{-2}$.

Итак, ПС могут лежать как в пределах валентных зон полупроводников, образующих ГП, так и в пределах зон проводимости. В заключение отметим, что если ПС на ГП лежит в пределах зон проводимости, то состояние, отвечающее первому уровню размерного квантования в квантовой яме, образованной такими ГП, существует как пограничное в определенном интервале значений продольного волнового вектора. Последнее обстоятельство может оказаться существенным для явлений, связанных с продольным транспортом электронов в квантовых ямах.

Автор выражает благодарность З. С. Грибникову и Ф. Т. Васьюко за обсуждение и полезные рекомендации.

Список литературы

- [1] Волков Б. А., Панкратов О. А. // Письма ЖЭТФ. 1985. Т. 42. В. 4. С. 145—148.
- [2] Сурис Р. А. // ФТП. 1986. Т. 20. В. 11. С. 2008—2015.
- [3] Дугаев В. К., Петров П. П. // ФТП. 1988. Т. 22. В. 3. С. 519—521.
- [4] Chang Y. C., Shulman J. N., Bastard G., Guldner Y., Voos M. // Phys. Rev. B. 1985. V. 31. N 4. P. 2557—2560.
- [5] Lin-Liu Y. R., Sham L. J. // Phys. Rev. B. 1985. V. 32. N 8. P. 5561—5563.
- [6] Korenman V., Drew H. D. // Phys. Rev. B. 1987. V. 35. N 12. P. 6446—6449.
- [7] Agassi D., Korenman V. // Phys. Rev. B. 1988. V. 37. N 17. P. 10095—10106.
- [8] Гавалешко Н. П., Горлей П. Н., Шендеровский В. А. Узкозонные полупроводники. Полуочение и физические свойства. Киев, 1984. 287 с.

Институт полупроводников
АН УССР
Киев

Получена 6.12.1988
Принята к печати 7.03.1989