

ТАММОВСКИЕ МИНИЗОНЫ В СВЕРХРЕШЕТКАХ

С.Г.Тиходеев

Институт общей физики АН СССР
117333, Москва

Поступила в редакцию 14 января 1991 г.

На простой точно решаемой одномерной модели проанализированы свойства таммовских минизон в сверхрешетках.

Интерфейсные, т.е. пространственно локализованные на границах различных слоев состояния в полупроводниковых сверхрешетках давно обсуждаются в литературе ¹⁻³, см. также ⁴. Теоретический анализ свойств интерфейсных состояний весьма сложен, так как требует знания комплексной зонной структуры (интерфейсные состояния являются таммовскими уровнями с мнимым квазиимпульсом ⁵).

В настоящем сообщении предлагается простая точно решаемая модель сверхрешетки, образованной одномерными решетками Кронига - Пенни с δ -образными потенциалами, в которой минизоны локализованных на интерфейсах состояний возникают вследствие взаимодействия таммовских состояний на соседних интерфейсах. В случае инвертированных зон такие минизоны возникают при любом перекрытии решеточных запрещенных зон, что в точности соответствует результатам работ ^{2,6}. При перекрытии не инвертированных зон таммовские минизоны возникают в меру различия блоховских функций краев зон и исчезают при увеличении энергетического разрыва соответствующих зон. Весьма важно отметить, что таммовские минизоны могут быть с хорошей точностью описаны в приближении огибающей, если при выводе граничных условий использовать точные блоховские функции краев зон в контактирующих слоях. При обычно используемых граничных условиях ⁷, получаемых из условия постоянства потока в приближении эффективной массы, скачком блоховских (огibaемых) функций пренебрегают, и это приводит к потере таммовских минизон (за исключением лишь случая инвертированных зон ^{2,6}).

Использование δ -функций объясняется стремлением максимально упростить задачу (полученные результаты справедливы и для прямоугольных барьеров конечных размеров). К удивлению автора, ему не удалось найти в литературе рассмотрения этой простой, но весьма поучительной модели. Близкая модель исследовалась в ⁸, но лишь применительно к изолированным интерфейсам. В последнее время интерес к подобным моделям возрос (см. ^{9,10}) в связи с замечательной работой ¹¹, в которой таммовские состояния были впервые экспериментально обнаружены в модельной системе из совокупности квантовых ям и барьера.

Рассмотрим одномерную модель сверхрешетки, составленной из чередующихся N_a и N_b "атомарных" слоев "веществ" A и B , с потенциалом:

$$V(x) = \begin{cases} p_a \delta(\{x\}), & 0 \leq x \leq N_a \\ V_b + p_b \delta(\{x\}), & N_a < x < N_a + N_b \end{cases} \quad (1)$$

Здесь $\{x\}$ - дробная часть x , приведен только один период сверхрешетки $D = N_a + N_b$, "межатомные" расстояния в "веществах" A и B взяты для простоты одинаковыми и равными 1, $\hbar = m = 1$. Параметр V_b позволяет

смещать (по энергии) спектры "веществ" A и B относительно друг друга и моделировать различные варианты перекрытия зон.

Как известно, спектр разрешенных состояний $E = E(k)$ в задаче Кронига - Пенни с δ -функционными потенциалами одного типа определяется из уравнения

$$\cos k = \cos \xi + \frac{p}{\xi} \sin \xi, \quad (2)$$

($\xi = \sqrt{2(E - V)}$) и представляет собой чередующиеся разрешенные и запрещенные зоны. Если $p > 0$, точки $\xi = \pi n$, $n = 1, 2, \dots$ являются нижними границами запрещенных зон (при $p < 0$ - верхними; это позволяет моделировать интерфейсы с инверсией зон, если $p_a p_b < 0$). В дальнейшем такие запрещенные зоны будем называть $n\pi$ -щелями.

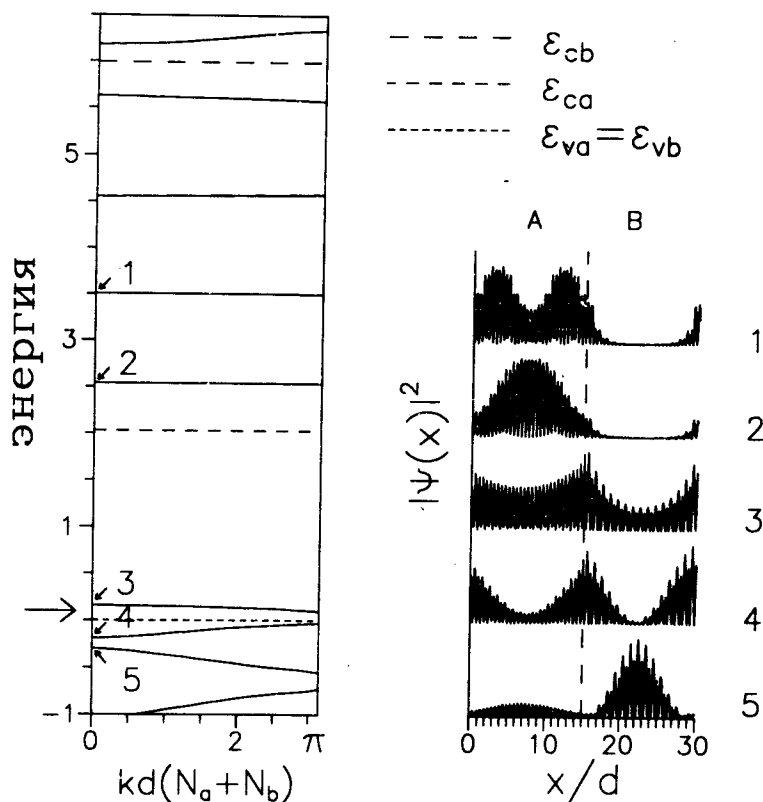


Рис. 1. Энергетический спектр (слева) и квадрат модуля волновой функции сверхрешетки при $N_a = N_b = 15$, $p_a = -1$, $p_b = -3$. (Значения E и $K = 0$, при которых проводились вычисления $|\Psi|^2$, показаны на левом рис. наклонными стрелками. Горизонтальная стрелка указывает положение таммовского уровня изолированного интерфейса.)

Собственное решение уравнения Шредингера с потенциалом (1), отвечающее энергии E , в интервале $0 < x < D$ имеет вид

$$\Psi(x) = \begin{cases} A_0 e^{-i\epsilon_a x} + B_0 e^{i\epsilon_a x}, & 0 < x < 1 \\ \dots & \dots \\ A_{D-1} e^{-i\epsilon_b x} + B_{D-1} e^{i\epsilon_b x}, & D - 1 < x < D \end{cases} \quad (3)$$

Здесь

$$\begin{pmatrix} A_m \\ B_m \end{pmatrix} = T_m \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix}, \quad (4)$$

а матрица перехода T_m является произведением m матриц перехода t_{aa} , t_{ab} , t_{bb} , t_{ba} между соседними "атомарными" слоями, явный вид которых легко выписывается через параметры $\xi_{a,b}$ и $p_{a,b}$.

Решения на всей оси x получаются из блоховского условия

$$\Psi(x + D) = e^{iKD} \Psi(x), \quad (5)$$

причем дисперсионное уравнение $E = E(K)$ для сверхрешетки задается уравнением, аналогичным (2):

$$\cos K = \frac{1}{2} \text{Tr}[t_{ab}(t_{bb})^{N_b-1} t_{ba}(t_{aa})^{N_a-1}]. \quad (6)$$

На рис.1 приведены типичные спектры и собственные функции (при $K = 0$), вычисленные по (6) и (3) при $N_a = N_b = 15$, $p_a = -1$, $p_b = -3$. Значение V_b выбрано так, чтобы в точности совпали нижние границы 2π -щелей решеток A и B . (Энергии на рис.1 отсчитываются именно от этого значения; уровни $\epsilon_{v(c)a}$ и $\epsilon_{v(c)b}$, отмеченные на рис.1 пунктиром, представляют собой нижние (верхние) границы 2π -щелей "веществ" A и B , соответственно). Видно, что две минизоны вблизи совпадающих краев "валентных" зон являются интерфейсными. Они возникли вследствие взаимодействия между собой таммовских состояний, локализованных на соседних интерфейсах.

Таммовские состояния на изолированных интерфейсах были недавно исследованы в рамках аналогичной модели в работе ⁸. Нетрудно показать, что энергия таммовского состояния для изолированного интерфейса может быть найдена из уравнения (для случая перекрытия $2n\pi$ -щелей)

$$\frac{\xi_a}{\sin \xi_a} \text{sh} \kappa_a + \frac{\xi_b}{\sin \xi_b} \text{sh} \kappa_b = p_b - p_a, \quad (7)$$

где $\kappa = |\text{Im}k|$ - мнимый квазиимпульс (решение уравнения (2) внутри щели). Например, если $p_b < p_a < 0$, таммовское состояние возникает вблизи нижних границ 2π -щелей, если они совпадают, и исчезает при увеличении разрыва зон. В ситуации, изображенной на рис.1, в случае изолированного интерфейса существовал бы таммовский уровень, положение которого показано горизонтальной стрелкой. Взаимодействие между состояниями на соседних интерфейсах в сверхрешетке (ввиду их слабой локализации) приводит к снятию вырождения и расщеплению уровней на две таммовские минизоны. При отсутствии вырождения у затравочных решеточных спектров, характерном для 1D ситуации, это совершенно общее топологическое свойство. В 3D случае ситуация может существенно усложниться.

Отметим следующее интересное обстоятельство. Несмотря на то, что нижняя таммовская минизона на рис.1 целиком попала в область разрешенных энергий обоих "веществ", волновые функции все-таки локализованы на интерфейсах. Причем если степень локализации верхней минизоны соответствует $\kappa_{a,b}$, то нижней - определяется интерференцией и зависит от $N_{a,b}$.

Если $p_a p_b < 0$, сшиваются инвертированные зоны, и таммовское состояние оказывается расположенным в центре перекрывающихся щелей. Эта ситуация была подробно проанализирована в литературе ^{2,6}. В сверхрешетке, опять же, взаимодействие интерфейсов приводит к образованию пары таммовских минизон. Характерный пример спектров и соответствующих волновых функций показан на рис.2.

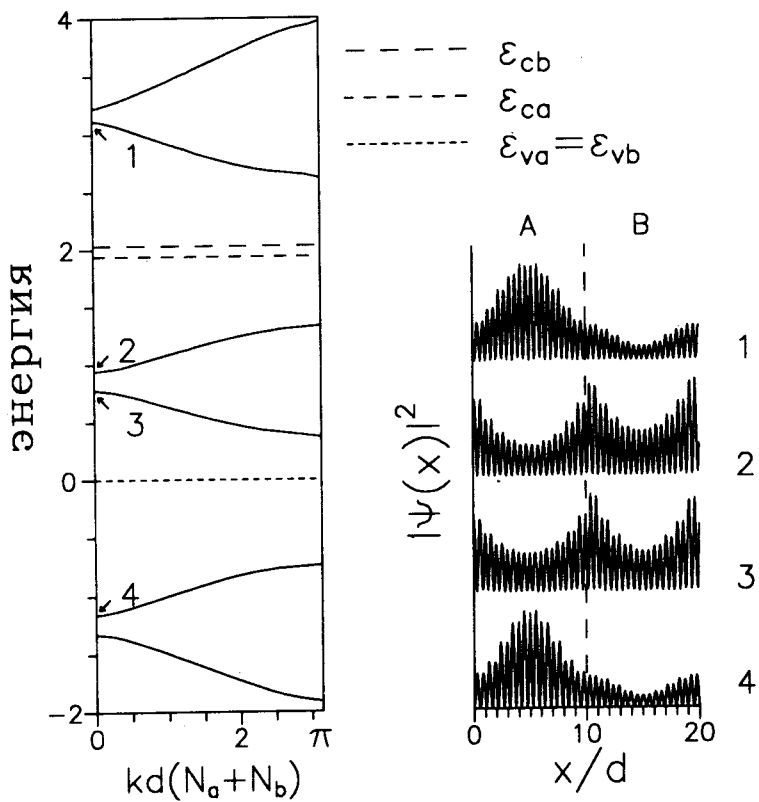


Рис. 2. Спектр (слева) и квадрат модуля волновой функции сверхрешетки при $N_a = N_b = 10$, $p_a = 1$, $p_b = -1$

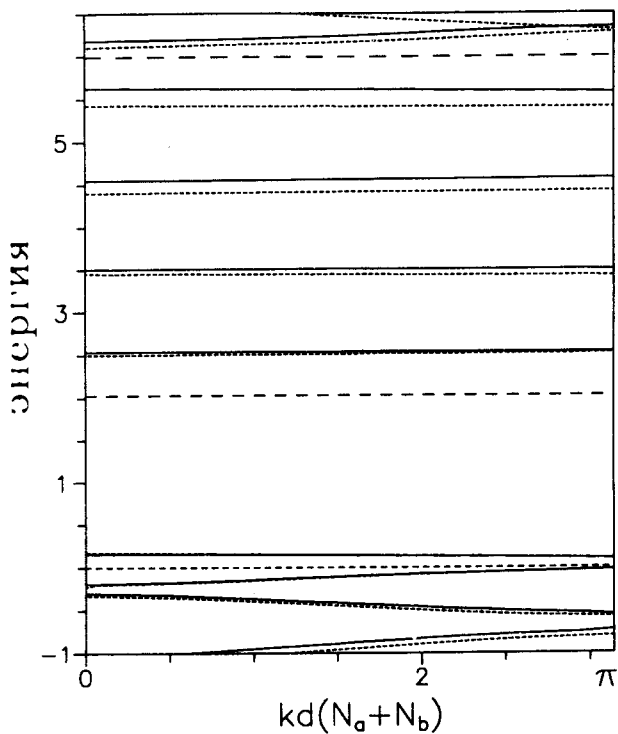


Рис. 3. Точный спектр сверхрешетки (сплошные линии) и вычисленный в рамках приближения огибающей (курсив), с учетом точного вида огибаемых блоховских функций, при $N_a = N_b = 15$, $p_a = -1$, $p_b = -3$. (Точность приближения особенно высока именно в случае тамбовских минизон)

Возвращаясь к ситуации, изображенной на рис.1 (т.е. $p_a p_b > 0$), отметим, что состояния, не являющиеся интерфейсными, совершенно типичны для данной сшивки зон. Расположенные выше таммовских четыре минизоны (в зоне "проводимости" более узкозонного "вещества" A) практически локализованы в соответствующих квантовых ямах. Состояния ниже таммовских - обычные делокализованные блоховские решения (в "веществе" B ширина щели больше, дырки тяжелее и поэтому преимущественно в нем локализованы). Такого типа состояния и получают обычно в рамках приближения огибающей. Однако интерфейсные состояния не возникают, если использовать граничные условия в приближении эффективной массы ⁷. Если же использовать точный вид краевых блоховских функций (т.е. огибаемых функций в методе огибающей), то удастся весьма хорошо описать точный спектр, в том числе и таммовские минизоны. Это видно из рис.3, на котором вместе с точным спектром, соответствующим рис.1 (сплошные линии) приведен спектр, вычисленный в приближении огибающей (курсив), использующим 1-ый порядок (кейновский) kr -теории возмущений и точный вид блоховских функций краев зон (3).

Автор благодарен Н.А.Гиппиусу за дискуссии и указание на роль точных граничных условий в методе огибающей и Л.В.Келдышу и Е.А.Мулярову за полезные обсуждения.

Литература

1. Yia-Chang C., Schulman J.N., Bastard G., Guldner Y., Voos M. Phys. Rev B, 1985, 31, 2557.
2. Cade N.A. J. Phys. C, 1985, 18, 5135.
3. Quiroga L., Camacho A., Brey L., Tejedor C. Phys. Rev. B, 1989, 40, 3955.
4. Smith D.L., Mailhot C. Rev. Mod. Phys., 1990, 62, 173.
5. Тамм И.Е. Phys. Z. Sowietunion, 1932, 1, 733.
6. Волков Б.А., Панкратов О.А. Письма в ЖЭТФ, 1986, 43, 99.
7. Bastard G. Phys.Rev. B, 1982, 25, 7584.
8. Trzeciakowski W. Phys. Rev. B, 1988, 38, 12493.
9. Stęślicka M., Kucharczyk R., Glasser M.L. Phys. Rev., 1990, 42, 1458.
10. Agulló F., Mendez E.E., Ohno H., Hong J.M. Phys. Rev., 1990, 42, 1470.
11. Ohno H. et al. Phys. Rev. Lett., 1990, 64, 2555.