Письма в ЖЭТФ, том 54, вып. 7, стр. 388 — 392 10 октября 1991 г.

ПРИГРАНИЧНЫЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В НАПРЯЖЕННЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ

В.Г.Канцер, Н.М.Малкова

Институт прикладной физики АН ССР Молдовы
277028, г.Кишинев

Поступила в редакцию 25 июля 1991 г.

Показано, что в напряженной гетероструктуре со встроенными поляризационными полями, индуцируемыми упругой деформацией, независимо от картины расположения зон полупроводников появляются двумерные электронные состояния с линейным спектром, существующие в ограниченной области энергий и поперечных импульсов.

Упругие деформации, возникающие в напряженных периодических гетероструктурах, существенно могут изменить их электронное строение, приводя к появлению целого ряда особенностей физических характеристик полупроводниковой системы. Настоящая работа посвящена изучению электронного энергетического спектра напряженных гетероструктур из пьезоэлектрических полупроводников.

Отсутствие центра симметрии в пьезоэлектрических материалах приводит к тому, что в напряженных многослойных структурах на их основе генерируются статические поляризационные поля, величина и ориентация которых зависят от направления роста структуры [1]. В напряженных сверхрешетках реализуется ситуация, когда один из альтернирующих слоев растягивается, а другой сжимается, в силу этого знак поляризации в отдельных слоях сверхрешетки может быть даже противоположным. Величина индуцированной однородной деформации слоев (a и b) поляризации $P_{a,b}$ определяется пьезоэлектрическим тензором $e_{14}^{a,b}$, упругими постоянными составляющих полупроводников, соотношениями толщин слоев, и она сопоставима по величине со спонтанной поляризацией в слабых сегнетоэлектриках [1]. Статические поляризационные поля могут возникать из-за флексиметрического эффекта и в структурах из полупроводников с центром симметрии при наличии градиента деформационных полей.

Простейшей моделью, позволяющей учесть влияние поляризации на энергетический спектр, является двухзонная kp-схема, которая в случае зеркально симметричных зон приобретает вид модифицированного уравнения Дирака

$$\begin{bmatrix} \Sigma(z) & \vec{\sigma}(\vec{p}+i\vec{\Delta}(z)) \\ \vec{\sigma}(\vec{p}-i\vec{\Delta}(z)) & -\Sigma(z) \end{bmatrix} \Psi = [E - V(z)]\Psi, \tag{1}$$

где $\Sigma(z) = E_g(z)/2$, функция $\Delta(z)$ связана со сдвигом подрешеток и пропорциональна величине поляризации, $\vec{\sigma}$ - матрицы Паули, $\vec{p} = -i\hbar(v_\perp\nabla_x, v_\perp\nabla_y, v_\|\nabla_z)$, $v_{\perp,\|}$ - фермиевские скорости электронов, $V(z)$ - потенциал, учитывающий изменение работы выхода в структуре. В $V(z)$ можно включить и слагаемые, связанные с электрическими полями, генерированными поляризацией. Прямое деформационное воздействие на спектр можно также учесть через перенормированные щелевые параметры.

В случае однородного полупроводника собственные значения уравнения (1) определяют четыре энергетические ветви [2], расщепленные по спину (рис.1).

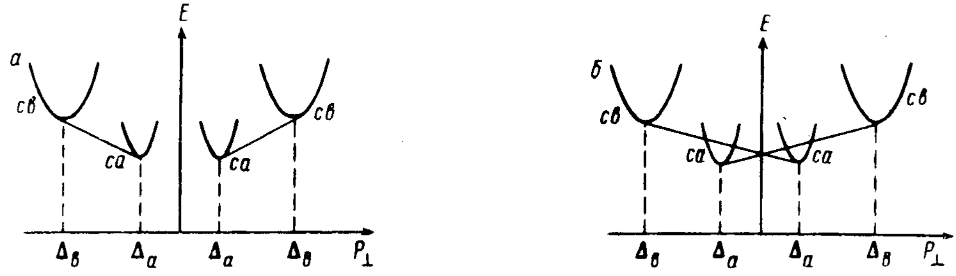

Рис. 1. Качественная картина спектра приграничных состояний в напряженной полупроводниковой гетероструктуре с нормальным расположением зон ($E_{ga}E_{gb} > 0$) : *а* - случай гетероконтакта с одинаковой ориентацией поляризации в слоях ($\Delta_a\Delta_b > 0$); *б* - случай гетероконтакта со встречной поляризацией в слоях ($\Delta_a\Delta_b < 0$). *ca*, *cb*, *va*, *vb* - объемные зоны в полупроводниках

В неоднородной полупроводниковой структуре величины Σ, Δ, V и другие являются функциями координат. При этом векторная величина $\vec{\Delta}$ может иметь различную ориентацию относительно оси z структуры. Будем рассматривать случай, когда направление $\vec{\Delta}$ совпадает с осью z структуры, т.е. $\vec{\Delta} = (0, 0, \Delta(z))$. Согласно [1] такая ситуация отвечает ориентации структуры вдоль тригональной оси кубического полупроводника. Кроме того, предположим, что пространственное изменение величин Σ, Δ, V задается одной и той же функцией $f(z)$, а параметры $v_{\perp,\|}$ будем считать одинаковыми для обоих полупроводников, формирующих структуру. Тогда пространственное изменение величин Σ, Δ и V для отдельного гетероконтакта можно записать в виде

$$\Sigma(z) = \Sigma_+ + \Sigma_- f(z), \quad \Delta(z) = \Delta_+ + \Delta_- f(z), \quad V(z) = \varphi_0/2f(z), \tag{2}$$

где $\Sigma_\pm = (E_{gb} \pm E_{ga})/4$, $\Delta_\pm = (\Delta_b \pm \Delta_a)/2$, а $f(z \to \pm\infty) = \pm 1$.

Для исследования энергетического спектра неоднородной структуры в виде гетероконтакта, следуя [3,4], преобразуем уравнение (1) в уравнение суперсимметричной квантовой механики. Для этого подействуем вначале матричным оператором левой части уравнения (1) на обе ее части. Полученное таким образом матричное уравнение при одинаковом пространственном изменении величин $\Sigma(z)$, $\Delta(z)$ и $V(z)$ удается диагонализовать с помощью унитарного преобразования

$$\hat{S} = \begin{pmatrix} \cos\theta & i\sin\theta \\ i\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix}, \quad \mathrm{tg}\theta = \frac{\Delta_- + (\Sigma_-^2 + \Delta_-^2 - V_0^2)}{(\Sigma_- + V_0)}, \tag{3}$$

коммутирующего с оператором $\hat{p}_z$. В результате матричное уравнение, определяющее электронное состояние неоднородной структуры, приобретает вид уравнения суперсимметричной квантовой механики

$$\left\{ \left[p_z^2 + W^2(z) + \hbar v_\| \sigma_z \otimes \tau_z \frac{dW(z)}{dz} \right] + \Sigma_+^2 + (\pm p_\perp + \Delta_+)^2 - E^2 - \right.$$

$$\left. - \frac{[\Sigma_+\Sigma_- + \Delta_-(\pm p_\perp + \Delta_+) + EV_0]^2}{\Sigma_-^2 + \Delta_-^2 - V_0^2} \right\} \Phi(z) = 0. \tag{4}$$

Здесь $\Phi(z)$ - огибающая волновой функции $\Psi = \exp(ik_\perp \rho)\hat{S}^{-1}\Phi(z)$; τ_z - матрица Паули, действующая в пространстве волновых функций, определяющих зону проводимости и валентную зону, $p_\perp = v_\perp |k_\perp| \hbar$ и, наконец, суперсимметричный потенциал $W(z)$ имеет вид

$$W(z) = (\Sigma_-^2 + \Delta_-^2 - V_0^2)^{1/2} \left[f(z) + \frac{\Sigma_+\Sigma_- + \Delta_-(\pm p_\perp + \Delta_+) + EV_0}{\Sigma_-^2 + \Delta_-^2 - V_0^2} \right]. \tag{5}$$

В соответствии с теоремой суперсимметричной квантовой механики [5], когда асимптотики суперпотенциала $W(z \to \pm\infty)$ имеют противоположные знаки, т.е. когда

$$\left| \frac{\Sigma_+\Sigma_- + \Delta_-(\pm p_\perp + \Delta_+) + EV_0}{\Sigma_-^2 + \Delta_-^2 - V_0^2} \right| \leq 1. \tag{6}$$

уравнения (4) имеют в качестве собственных значений так называемую нулевую моду. Это решение определяет локализованные у границы раздела двумерные приграничные электронные состояния вейлевского типа [4]. При избранных нами асимптотиках $W(\infty) > 0$ и $W(-\infty) < 0$ нулевая мода уравнения (4) возникает при $\sigma_z \otimes \tau_z = -1$. В соответствии с этим энергетический спектр приграничных состояний является невырожденным по спину и определяется соотношениями

$$E = \{-\Sigma_+(V_0\Sigma_- + D\Delta_-) + (\Delta_+ \pm p_\perp)(D\Sigma_- - V_0\Delta_-)\}(\Sigma_-^2 + \Delta_-^2)^{-1}, \tag{7}$$

при $(V_0 D - \Sigma_-\Delta_-)(\Delta_-^2 - V_0^2)^{-1} \geq 0$,

$$E = \{-\Sigma_+(V_0\Sigma_- - D\Delta_-) - (\Delta_+ \pm p_\perp)(D\Sigma_- + V_0\Delta_-)\}(\Sigma_-^2 + \Delta_-^2)^{-1}, \tag{8}$$

при $(V_0 D + \Sigma_-\Delta_-)(\Delta_-^2 - V_0^2)^{-1} \leq 0$, где $D = (\Sigma_-^2 + \Delta_-^2 - V_0^2)^{1/2}$ и $|V_0| \leq (\Sigma_-^2 + \Delta_-^2)^{1/2}$.

Нулевая мода уравнения (4) существует, когда асимптотики суперпотенциала (5) при $z \to \pm\infty$ имеют противоположные знаки, т.е. при выполнении условий (6). В соответствии с этим приграничные электронные состояния существуют в ограниченных областях энергий и поперечных импульсов $p_\perp = \hbar v_\perp k_\perp$. Эти области определяются соотношениями:

$$-V_0 - \frac{(\Sigma_+ - \Sigma_-)}{\Delta_-^2 - V_0^2}(\Delta_- D - V_0\Sigma_-) \leq E \leq V_0 - \frac{(\Sigma_+ + \Sigma_-)}{\Delta_-^2 - V_0^2}(\Delta_- D - V_0\Sigma_-)$$

$$(9)$$

$$-\Delta_- - \frac{(\Sigma_+ + \Sigma_-)}{\Delta_-^2 - V_0^2}(\Delta_-\Sigma_- - DV_0) \leq \Delta_+ \pm p_\perp \leq \Delta_- - \frac{(\Sigma_+ - \Sigma_-)}{\Delta_-^2 - V_0^2}(\Delta_-\Sigma_- DV_0)$$

для энергетической ветви (7), и

$$V_0 + \frac{(\Sigma_+\Sigma_-)}{\Delta_-^2 - V_0^2}(\Delta_- D + V_0\Sigma_-) \leq E \leq -V_0 + \frac{(\Sigma_+ - \Sigma_-)}{\Delta_-^2 - V_0^2}(\Delta_- D + V_0\Sigma_-)$$

$$(10)$$

$$\Delta_- - \frac{(\Sigma_+ - \Sigma_-)}{\Delta_-^2 - V_0^2}(\Delta_-\Sigma_- - DV_0) \leq \Delta_+ \pm p_\perp \leq -\Delta_- + \frac{(\Sigma_+ + \Sigma_-)}{\Delta_-^2 - V_0^2}(\Delta_-\Sigma_- + DV_0)$$

для энергетической ветви (8).

Двумерные электронные состояния приграничного типа впервые были предсказаны и изучены в [3] для гетероструктуры на основе контакта двух полупроводников с взаимно инвертированными зонами ($E_{ga}E_{gb} < 0$). Как следует из (7), (8) электронные состояния приграничного типа могут существовать в любой полупроводниковой гетероструктуре, т.е. и при $E_{ga}E_{gb} > 0$. Для ненапряженной гетероструктуры ($\Delta_a = \Delta_b = 0$) необходимым условием является лишь конечная величина разности работ выхода ($V_0 \neq 0$) [6-8]. При этом в отличие от гетероконтакта с инверсией зон [3,4], когда приграничные состояния попадают по энергии в запрещенные зоны исходных полупроводников, в случае гетероконтакта с нормальным расположением зон ($E_{ga}E_{gb} > 0$) ветви приграничных состояний появляются либо в пределах объемных валентных зон (при $V_0\Sigma_- > 0$), либо в пределах объемных зон проводимости (при $V_0\Sigma_- > 0$) (рис.1).

Более богатой является картина приграничных энергетических ветвей в случае напряженных полупроводниковых гетероструктур, т.е. когда $\Delta_a \neq 0$ и $\Delta_b \neq 0$. Проанализируем вначале случай гетероконтакта с нормальным расположением зон $E_{ga}E_{gb} > 0$ и $\Sigma_+ > 0$. Во-первых, отметим, что при $E_{ga} = E_{gb}$, $V_0 = 0$ и $\Delta_+ = 0$ ($\Delta_a = -\Delta_b$) из (7), (8) получаем спектр двумерных "тяжелых фермионов", изученных ранее в так называемой суперсимметричной сегнетоэлектрической доменной стенке [9]. При $V_0 \neq 0$ двумерные приграничные зоны приобретают конечную ширину и спектр "тяжелых фермионов" [9] становится дисперсным. Его двумерные энергетические ветви при $\Delta_-V_0 > 0$ располагаются на фоне обьемных валентных зон, а при $\Delta_-V_0 < 0$ на фоне зон проводимости (рис.1).

Для анализа картины приграничных состояний в общем случае ($\Sigma_- \neq 0$, $\Delta_- \neq 0$, $V_0 \neq 0$) важным является рассмотрение частного случая $\Sigma_- \neq 0$, $\Delta_- \neq 0$, но $V_0 = 0$. Из (7), (8) легко заметить, что приграничные электронные состояния появляются лишь при $\Sigma_-\Delta_- \leq 0$. Поэтому, когда $\Sigma_-\Delta_- \geq 0$ двумерные электронные состояния на гетероконтакте появляются лишь при конечных значениях разности работ выхода ($V_0 \neq 0$). Двумерные приграничные зоны в этом случае располагаются либо на фоне объемных зон проводимости при $\Sigma_- > 0$, $\Delta_- > 0$, $-(\Sigma_-^2 + \Delta_-^2)^{1/2} \leq V_0 \leq \min\{-|\Delta_-|, -|\Sigma_-|\}$ и при $\Sigma_- < 0$, $\Delta_- < 0$, $\max\{|\Sigma_-|, |\Delta_-|\} \leq V_0 \leq (\Sigma_-^2 + \Delta_-^2)^{1/2}$, либо на фоне валентных зон при $\Sigma_- > 0$, $\Delta_- > 0$, $\max\{|\Sigma_-|, |\Delta_-|\} \leq V_0 \leq (\Sigma_-^2 + \Delta_-^2)^{1/2}$ и при $\Sigma_- < 0$, $\Delta_- < 0$, $-(\Sigma_-^2 + \Delta_-^2)^{1/2} \leq V_0 \leq \min\{-|\Delta_-|, -|\Sigma_-|\}$. При этом отметим, что при $|V_0| = |\Sigma_-|$ двумерные зоны становятся бездисперсионными как в случае сегнетоэлектрической доменной сетки [9].

Условия существования приграничных состояний в напряженных гетероструктурах с нормальным расположением зон ($E_{ga}E_{gb} \geq 0$) являются менее жесткими в случае $\Sigma_-\Delta_- \leq 0$ и охватывают, как уже отмечалось, и точку $V_0 = 0$. В зависимости от конкретных условий уровни энергии этих состояний также располагаются либо на фоне валентных зон исходных полупроводников, либо на фоне зон проводимости.

До сих пор при анализе мы рассмотрели лишь гетероструктуры с нормальным расположением зон ($E_{ga}E_{gb} > 0$). Для гетероконтакта с инверсией зон ($E_{ga}E_{gb} < 0$, т.е. $|\Sigma_+| < |\Sigma_-|$), как следует из (9), (10), энергетический интервал существования приграничных электронных состояний намного шире. Двумерные энергетические ветви тянутся от одной из расщепленных по спину объемных валентных зон до одной из зон проводимости (рис.2). При $\Delta_a = \Delta_b = 0$ из (7), (8) получаем энергетические ветви, рассмотренные ранее в [4,5]. Согласно (9), (10) область существования приграничных состояний

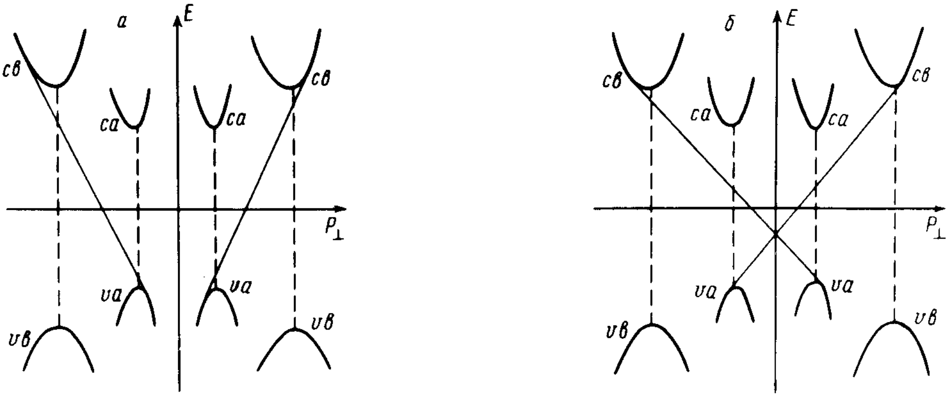

Рис. 2. Энергетические ветви приграничных состояний в напряженной гетероструктуре с инверсией зон. Обозначения те же, что и на рис.2

ограничена не только по энергии, но и по величине поперечного импульса $p_\perp$. Анализ вторых условий (9) и (10) показывает, что область существования по $p_\perp$ в значительной степени определяется знаками поляризации в контактирующих полупроводниковых слоях. Если $\Delta_a\Delta_b > 0$, т.е. $|\Delta_+| > |\Delta_-|$, то приграничные электронные состояния могут возникать лишь при конечных значениях поперечного импульса (рис.1*а*, 2*а*). В случае же $\Delta_a\Delta_b < 0$, т.е. $|\Delta_+| < |\Delta_-|$ уровни энергий существуют и при $p_\perp = 0$, и соответственно область существования намного шире (рис.1*б*, 2*б*).

В заключение отметим, что в работе мы коснулись лишь вейлевских приграничных электронных состояний напряженного полупроводникового контакта, связанных с нулевой модой суперсимметричного потенциала (5). Они являются невырожденными по спину, бесщелевыми и имеют линейный закон дисперсии. Наряду с вейлевскими состояниями могут появляться и другие локализованные на границе раздела состояния. В отличие от вейлевских они также как в гетероконтакте с инверсией зон [4,5] являются вырожденными по спину и имеют конечную щель в спектре. Число этих состояний и их энергетический спектр определяются конкретным видом функции $f(z)$ из (1). В случае резкого гетероконтакта (ступенчатое изменение $f(z)$) появляются лишь состояния вейлевского типа, соответствующие нулевой моде.

Авторы выражают благодарность Б.А.Волкову за обсуждение результатов работы.

1. Smith D.L., Mailhiot C. J. Appl. Phys., 1988, 63, 2717.
2. Bangert E. Lect. Notes in Phys., 1982, 152, 216.
3. Волков Б.А., Панкратов О.А. Письма в ЖЭТФ, 1985, 42, 145.
4. Pankratov O.F., Pakhomov S.V., Volkov B.A. Sol. St. Comm., 1987, 61, 93.
5. Генденштейн Л.Э., Криве И.В. УФН, 1985, 146, 553.
6. Гицу Д.В., Канцер В.Г., Леляков И.А. Препринт ИПФ АН МССР, N 4, Кишинев, 1988.
7. Кисин М.В. ФТП, 1989, 23, 292.
8. Райчев О.Э. ФТП, 1989, 23, 1226.
9. Волков Б.А., Панкратов О.А. Письма в ЖЭТФ, 1986, 43, 99.