

ВЛИЯНИЕ ДОМЕННОЙ СТРУКТУРЫ НА ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР УЗКОЩЕЛЕВЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ-СЕГНЕТОЭЛЕКТРИКОВ

Б.Г.Идлис, М.Ш.Усманов

Физический институт им. П.Н.Лебедева РАН,
117924, Москва, Россия

Поступила в редакцию 30 июля 1992 г.

Рассмотрен спектр узкощелевого полупроводника-сегнетоэлектрика. Показано, что при наличии в нем сегнетоэлектрического домена от объемного спектра отщепляются состояния, локализованные как на границах домена, так и внутри него. Эти состояния невырождены и обладают дисперсией в отличие от состояний "тяжелых фермионов" на отдельной доменной стенке.

В работе ¹ рассмотрено влияние доменной стенки на спектр сегнетоэлектрической фазы узкощелевых полупроводников группы A^4B^6 . Показано, что у петли экстремумов объемных зон возникает бездисперсионное дважды вырожденное состояние, локализованное на доменной стенке. Заметим, что рассматривалась так называемая "встречная" доменная стенка, когда вектор поляризации направлен по нормали к последней. Такие стенки должны обладать электрическим зарядом, и в зависимости от знака этого заряда упомянутое локализованное состояние возникает либо у дна зоны проводимости, либо у потолка валентной зоны.

Поскольку полупроводник в целом нейтрален, то при образовании доменной структуры появляется как минимум две стенки с противоположными зарядами, ограничивающие домен с определенной поляризацией. Влиянию такого домена на электронный спектр полупроводника и посвящена настоящая статья.

В двухзонном приближении энергетический спектр полупроводников-сегнетоэлектриков описывается уравнением типа Дирака ^{1,2}:

$$\hat{H}\hat{\psi} \equiv [\gamma^0\gamma^3\hat{p}_z + \gamma^0(\vec{\gamma} \cdot \mathbf{k}_\perp) + \gamma^0\Delta(z) + i\gamma^3u(z) + \varphi(z)]\hat{\psi} = \epsilon\hat{\psi}, \quad (1)$$

где $2\Delta(z)$ и $\varphi(z)$ - зависящие от координаты ширина запрещенной зоны и работа выхода, $u(z)$ - величина, пропорциональная поляризации вдоль оси z , $\hat{p} = -i\nabla$, γ^0 и $\vec{\gamma} = (\gamma^1, \gamma^2, \gamma^3)$ - матрицы Дирака. В уравнении (1) все энергетические параметры нормированы на величину $\hbar v$, где v - постоянный матричный элемент межзонного перехода, а волновая функция $\hat{\psi}$ имеет вид $\hat{\psi} = \hat{\psi}(z)\exp(ik_\perp r)$, где $\mathbf{k}_\perp = (k_x, k_y, 0)$.

Гамильтониан \hat{H} коммутирует с оператором псевдочетности ³:

$$\hat{P} = i\gamma^0\gamma^3(\vec{\gamma} \cdot \mathbf{k}_\perp)/k_\perp, \quad (2)$$

собственные значения которого равны $\lambda = \pm 1$. Поэтому в качестве волновых функций (1) можно выбрать собственные функции оператора \hat{P} , так что $\hat{P}\hat{\psi}_\lambda = \lambda\hat{\psi}_\lambda$ и уравнение для $\hat{\psi}_\lambda$ приобретает вид:

$$\{\gamma^0[\gamma^3\hat{p}_z + \Delta(z)] + i\gamma^3[u(z) - \lambda k_\perp] + \varphi(z) - \epsilon\}\hat{\psi}_\lambda(z) = 0. \quad (3)$$

После квадрирования этого уравнения получим:

$$\{\hat{p}_z^2 + \Delta^2(z) + [u(z) - \lambda k_\perp]^2 - [\epsilon - \varphi(z)]^2 + i \frac{d}{dz} [\gamma^3 \Delta(z) - \gamma^0 \gamma^3 \varphi(z) + i \gamma^0 u(z)]\} \hat{\psi}_\lambda(z) = 0. \quad (4)$$

Матричную часть этого уравнения можно диагонализировать только в том случае, если пространственная зависимость параметров Δ , u и φ определяется одной и той же функцией $f(z)$:

$$\Delta(z) = \bar{\Delta} + \Delta_0 f(z), \quad u(z) = \bar{u} + u_0 f(z), \quad \varphi(z) = \varphi_0 f(z). \quad (5)$$

Так и диагонализация осуществляется с помощью канонического преобразования $\hat{p} = \hat{S} \hat{\chi}$, где

$$\hat{S} = \exp\left(\frac{\alpha}{2} \gamma^0\right) \exp\left(i \frac{\beta}{2} \gamma^0 \gamma^3\right),$$

$$\text{th} \alpha = \varphi_0 / \Delta_0, \quad \text{tg} \beta = u_0 / \sqrt{\Delta_0^2 - \varphi_0^2}. \quad (6)$$

В результате, уравнение (4) приобретает суперсимметричный вид:

$$[\hat{p}_z^2 + W_\lambda^2(z) - i \gamma^3 \frac{dW_\lambda}{dz}] \hat{\chi}_\lambda = \bar{\epsilon}^2 \hat{\chi}_\lambda, \quad (7)$$

с суперпотенциалом

$$W_\lambda(z) = \bar{w}_\lambda + \kappa f(z), \quad (8)$$

и собственной энергией

$$\bar{\epsilon}^2 = \epsilon^2 - \bar{\Delta}^2 - (\bar{u} - \lambda k_\perp)^2 + \bar{w}_\lambda^2, \quad (9)$$

где $\bar{w}_\lambda = [\bar{\Delta} \Delta_0 + (\bar{u} - \lambda k_\perp) u_0 + \epsilon \varphi_0] / \kappa$, $\kappa = (\Delta_0^2 + u_0^2 - \varphi_0^2)^{1/2}$.

Выберем пространственную зависимость $f(z)$ в виде прямоугольной "ямы" шириной $2a$ и барьерами $(1 + \mu_L)$ и $(1 + \mu_R)$:

$$f(z) = 1 + \mu_L + \mu_R - (1 + \mu_L) \theta(a + z) - (1 + \mu_R) \theta(a - z), \quad (10)$$

что соответствует резкому изменению параметров (5) полупроводниковой структуры ($\theta(z)$ — единичная ступенчатая функция). В результате решения уравнения (7) получается дисперсионное уравнение

$$\text{th}(2qa) = \frac{q(q_L + q_R + \kappa_L - \kappa_R)}{(\kappa + \kappa_L)(\kappa + \kappa_R) - q^2 - q_L q_R + q_L(\kappa + \kappa_R) - q_R(\kappa + \kappa_L)}, \quad (11)$$

в точности совпадающее с полученным в работе ³. Здесь

$$q_{L,R}^2 = (\bar{w}_\lambda + \kappa_{L,R})^2 - (\bar{w}_\lambda - \kappa)^2 + q^2,$$

$$q^2 = (\bar{w}_\lambda - \kappa)^2 - \bar{\epsilon}^2 = (\bar{\Delta} - \Delta_0)^2 + (\bar{u} - u_0 - \lambda k_\perp)^2 - (\epsilon + \varphi_0)^2, \quad (12)$$

$$\kappa_{L,R} = \kappa \mu_{L,R}.$$

При отсутствии поляризации ($\bar{u} = u_0 = 0$) выражения (8), (9) и (12) сводятся к результатам для квантовой ямы, образованной полупроводниками с взаимно инвертированными зонами ³. В настоящей работе нас будет интересовать спектр полупроводниковой структуры при наличии в ней электрических доменов.

Отдельная доменная стенка в двухзонном полупроводнике приводит к появлению локализованных состояний с "бесконечной" массой¹, спектр которых двукратно вырожден по λ и ограничен в пространстве поперечных импульсов ($k_{\perp} \leq u_0$), а энергия $\epsilon = \pm \bar{\Delta}$ в зависимости от знака заряда доменной стенки. Эти состояния отвечают нулевой моде в суперсимметричном гамильтониане (7).

Для простоты рассмотрим однородный собственный полупроводник, в котором имеется один электрический домен размером $2a$, что соответствует случаю $\Delta_0 = \varphi_0 = \bar{u} = 0$, $\mu_L = \mu_R = 1$ в выражениях (5) и (10). Тогда дисперсионное уравнение (11) приобретает вид:

$$\text{th}(2qa) = \frac{q\sqrt{q^2 - 4\lambda k_{\perp} u_0}}{2u_0(u_0 + \lambda k_{\perp}) - q^2}. \quad (13)$$

Корни этого уравнения определяют энергетический спектр локализованных состояний:

$$\epsilon = \pm \sqrt{\bar{\Delta}^2 + (u_0 + \lambda k_{\perp})^2 - q^2}. \quad (14)$$

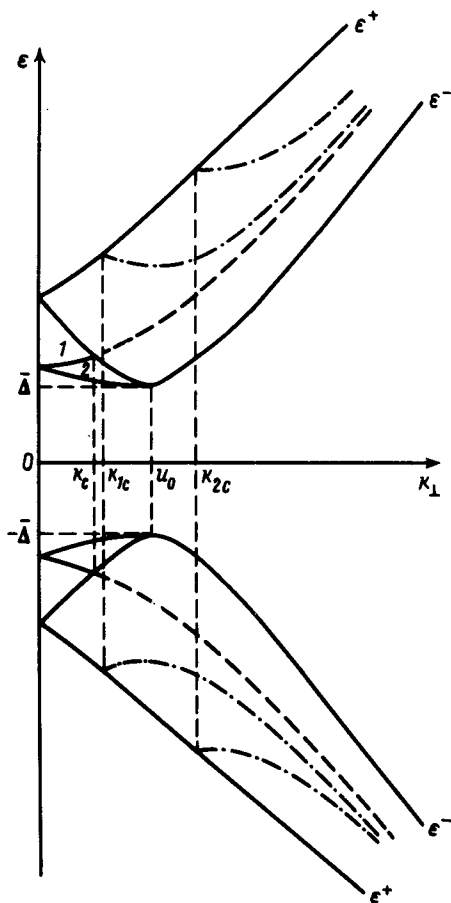
При $a \rightarrow \infty$ (две бесконечно удаленных друг от друга стенки) решением уравнения (13) является $q = u_0 + \lambda k_{\perp}$ и спектр состоит из двух вырожденных ветвей с энергиями $\epsilon = \pm \bar{\Delta}$. В случае конечных размеров домена вырождение по λ снимается. Несложный анализ уравнений (13) и (14) позволяет получить качественный вид спектра, показанный на рисунке. Состояниям, локализованным на границах домена, соответствуют сплошные кривые 1 и 2. Из рисунка видно, что эти состояния существуют в области поперечных импульсов $0 \leq k_{\perp} \leq u_0$ ($\lambda = +1$) и $0 \leq k_{\perp} \leq k_c$ ($\lambda = -1$), где

$$k_c = u_0 \left(1 - \frac{\sqrt{1 + 16a^2 u_0^2 - 1}}{8a^2 u_0^2} \right). \quad (15)$$

Для состояний с отрицательной четностью при $k_{\perp} \geq k_c$ решение дисперсионного уравнения (13) становится чисто мнимым и волновая функция из экспоненциально спадающей на границах домена переходит в осциллирующую, то есть штриховая линия на рисунке отвечает состояниям "размерного" квантования внутри домена. Отметим, что кроме этой ветви при $k_{\perp} \geq k_{n,c}$, где

$$k_{n,c} = \frac{1}{4u_0} \left(\frac{n\pi}{2a} \right)^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (16)$$

появляется целая серия "размерно-квантованных" состояний (штрихпунктирные линии на рисунке) с отрицательной четностью. По мере уменьшения размеров домена в пределе $a \rightarrow 0$ значения $k_{n,c} \rightarrow \infty$ и эти ветви исчезают. При этом поверхностные состояния с $\lambda = +1$ сливаются с ветвью объемного спектра $\epsilon^- = \pm[\bar{\Delta}^2 + (u_0 - k_{\perp})^2]^{1/2}$, а состояния с $\lambda = -1$ переходят в размерно-квантованные ($k_c \rightarrow 0$) и сливаются с ветвью $\epsilon^+ = \pm[\bar{\Delta}^2 + (u_0 + k_{\perp})^2]^{1/2}$ и мы имеем обычный непрерывный спектр однородного полупроводника-сегнетоэлектрика. В другом предельном случае $a \rightarrow \infty$ ветви поверхностных состояний, как уже отмечалось, вырождаются в бездисперсионные с энергией $\epsilon = \pm \bar{\Delta}$, а ветви размерно-квантованных состояний сгущаются к конической точке ($k_{n,c} \rightarrow 0$) и сливаются с ветвью ϵ^- .



Электронный спектр полупроводника-сегнетоэлектрика при наличии в нем электрического домена. Ветви ϵ^+ и $\bar{\epsilon}^-$ – объемный спектр однородного сегнетика; сплошные линии 1 и 2 – ветви локализованных (на границах домена) состояний с положительной и отрицательной четностями, соответственно; штриховая и штрих-пунктирные линии – ветви размерно-квантованных (внутри домена) состояний с отрицательной четностью

Приведенный анализ позволяет проследить генезис появления локализованных состояний в полупроводнике-сегнетоэлектрике при образовании в последнем доменной структуры. Отметим, что учет наряду с поляризацией неоднородностей, связанных с изменением работы выхода и ширины запрещенной зоны, качественно не изменит картину, как это видно на примере отдельной доменной стенки на границе раздела двух полупроводников ⁴.

В заключение благодарим Б.А.Волкова за полезные обсуждения результатов работы.

1. Б.А.Волков, О.А.Панкратов, Письма в ЖЭТФ **43**, 99 (1986).
2. О.А.Панкратов, Письма в ЖЭТФ **45**, 82 (1987).
3. Б.Г.Идлис, М.Ш.Усманов, ФТП **26**, 329 (1992).
4. В.Г.Канцер, Н.М.Малкова, Письма в ЖЭТФ **54**, 388 (1991).