Письма в ЖЭТФ, том 33, вып. 2, стр. 115 – 118 *20 января 1981 г.*

ПОВЕРХНОСТНЫЕ СОСТОЯНИЯ В БЕСЩЕЛЕВОМ ПОЛУПРОВОДНИКЕ

М.И.Дьяконов, А.В.Хаецкий

Показано, что в бесщелевых полупроводниках типа α-Sn, HgTe существуют специфические поверхностные состояния, представляющие собой суперпозицию состояний электрона в валентной зоне и в зоне проводимости. Эффективная масса, определяющая движение вдоль поверхности в этих состояниях, зависит от отношения масс свободных электрона и дырки.

В бесщелевом полупроводнике с инверсной зонной структурой [1], как мы покажем, существуют дополнительные ветви электронного спектра, обусловленные поверхностными состояниями. Волновая функция электрона в таком состоянии обращается в нуль на поверхности, имеет максимум на некотором расстоянии от нее и экспоненциально спадает в вглубь кристалла. Характерный масштаб изменения волновой функции в направлении, перпендикулярном к поверхности, порядка $1/k$, гдк k – волновой вектор вдоль поверхности. Поэтому рассматриваемые поверхностные состояния могут быть описаны в рамках метода эффективной массы. Насколько нам известно, это единственный случай, когда возможно такое рассмотрение поверхностных состояний.

Электронный спектр бесщелевого полупроводника вблизи точки вырождения зон описывается, как известно, гамильтонианом Латтинжера [2]

$$H = \frac{1}{2m_0}\left[\left(\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma\right)\mathbf{p}^2 - 2\gamma(\mathbf{pJ})^2\right], \qquad (1)$$

где $\mathbf{p}$ – оператор квазиимпульса, J_x, J_y, J_z – матрицы 4×4, соответствующие моменту 3/2. Мы ограничиваемся сферическим приближением. Эффективные массы электрона и дырки даются выражениями $m_e = m_0/(\gamma_1 + 2\gamma)$, $m_h = m_0/(2\gamma - \gamma_1)$. Здесь m_0 – масса свободного электрона, $\gamma = (2\gamma_2 + 3\gamma_3)/5$, $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ – параметры Латтинжера. Предполагается, что $\gamma_1 + 2\gamma = 0$ и $2\gamma - \gamma_1 > 0$.

Пусть кристалл занимает область $z > 0$. Поверхностные состояния описываются решениями уравнения $H\psi = E\psi$, удовлетворяющими граничному условию $\psi(0) = 0$ и убывающими при $z \to \infty$. Пусть волновой вектор k в плоскости поверхности направлен вдоль оси x. При заданных значениях k и энергии E имеются четыре независимых решения уравнения Шредингера с гамильтонианом (1), убывающих при $z \to \infty$: $\phi_a^{(1)}\exp(ikx - \kappa_1 z)$, $\phi_a^{(2)}\exp(ikx - \kappa_2 z)$. Значок a принимает два значения $a = 1, 2$, положительные величины κ_1 и κ_2 выражаются через E и k:

$$E = \frac{\hbar^2(k^2 - \kappa_1^2)}{2m_e} = -\frac{\hbar^2(k^2 - \kappa_2^2)}{2m_h}. \qquad (2)$$

Спиноры $\phi_a^{(1)}$ и $\phi_a^{(2)}$ в представлении, в котором матрица J_z диагональна, можно выбрать в виде

$$\phi_1^{(1)} = \begin{pmatrix} i\lambda_1 \\ 1 \\ -i \\ -\lambda_1 \end{pmatrix}; \qquad \phi_1^{(2)} = \begin{pmatrix} 1 \\ -i\lambda_2 \\ \lambda_2 \\ -i \end{pmatrix}, \qquad (3)$$

где $\lambda_1 = k\sqrt{3}/(2\kappa_1 + k)$, $\lambda_2 = k\sqrt{3}/(2\kappa_2 + k)$. Спиноры $\phi_2^{(1)}$ и $\phi_2^{(2)}$ получаются из (3) путем замены $k \to -k$ и комплексного сопряжения.

Решение, удовлетворяющее указанным выше граничным условиям, очевидно имеет вид

$$\psi = \Phi e^{ikx}(e^{-\kappa_1 z} - E^{-\kappa_2 z}), \qquad (4)$$

где спинор Ф представляет собой линейную комбинацию спиноров $\phi_a^{(1)}$ (или $\phi_a^{(2)}$) с коэффициентами $C_a^{(1)}$, $C_a^{(2)}$, причем

$$C_1^{(1)}\phi_1^{(1)} + C_2^{(1)}\phi_2^{(1)} = C_1^{(2)}\phi_1^{(2)} + C_2^{(2)}\phi_2^{(2)}. \tag{5}$$

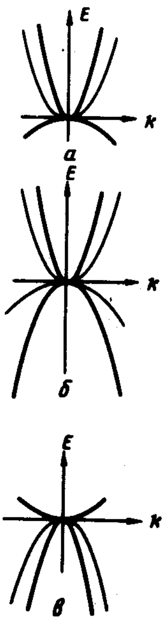
Система уравнений (5) относительно коэффициентов C имеет ненулевое решение лишь при определенном соотношении между величинами κ_1, κ_2 и k. Это соотношение, совместно с уравнением (2), определяет зависимость $E(k)$ для поверхностных состояний. Как нетрудно убедиться, имеется две возможности: либо $C_2^{(1)} = C_1^{(2)} = 0$ и $\lambda_1(k)\times\lambda_2(-k)+1=0$, либо $C_1^{(1)} = C_2^{(2)} = 0$ и $\lambda_1(-k)\lambda_2(k)+1=0$.

Решение этих уравнений при условии (2) зависит от отношения масс электрона и дырки $\beta = m_e/m_h$:

$$\kappa_1 = (1+\sqrt{3\beta})\,|k|/2, \qquad \kappa_2 = (\sqrt{3/\beta}-1)\,|k|/2 \qquad \text{при } \beta < 3\,; \tag{6}$$

$$\kappa_1 = (\sqrt{3\beta-1})\,|k|/2, \qquad \kappa_2 = (\sqrt{3/\beta}+1)\,|k|/2 \qquad \text{при } \beta > 1/3. \tag{7}$$

Таким образом, в интервале $1/3 < \beta < 3$ существуют оба решения (6) и (7), а вне этого интервала существует только одно решение.



Спектр объемных (жирные линии) и поверхностных (тонкие линии) состояний в бесщелевом полупроводнике: *а* – $\beta < 1/3$, *б* – $1/3 < \beta < 3$, *в* – $\beta > 3$

Энергетический спектр поверхностных состояний является параболическим: $E = \hbar^2k^2/2m_s$. Эффективная масса m_s определяется путем подстановки выражений (6), (7) в (2):

$$\frac{m_e}{m_{s1}} = 1 - \left(\frac{1+\sqrt{3\beta}}{2}\right)^2 \qquad \text{при } \beta < 3; \tag{8}$$

$$\frac{m_e}{m_{s2}} = 1 - \left(\frac{\sqrt{3\beta}-1}{2}\right)^2 \qquad \text{при } \beta > 1/3. \tag{9}$$

Ветви энергетического спектра, соответствующие поверхностным состояниям в бесщелевом полупроводнике, схематически изображены на рисунке. При $\beta < 1/3$ имеются поверхностные состояния электронного типа, причем в пределе $\beta \to 0$ их эффективная масса m_{s1} стремится к значению $(4/3)\, m_e$. При $\beta = 1/3$ масса m_{s1} обращается в бесконечность, и от электронного спектра объемных состояний отщепляется вторая ветвь поверхностных состояний с массой $m_{s2} = m_e$. В интервале $1/3 < \beta < 3$ существуют два типа поверхностных состояний: электронные с массой m_{s2} и дырочные с массой $m_{s1} < 0$. При $\beta = 3$ масса m_{s2} обращается в бесконечность, а $m_{s1} = -m_h$, так что дырочная ветвь поверхностных состояний сливается со спектром объемных состояний дырок. Наконец, при $\beta > 3$ существует одна дырочная ветвь поверхностных ных состояний с массой $m_{s2} < 0$. В пределе $\beta \to \infty$ масса m_{s2} стремится к значению $-(4/3)\, m_h$.

Спиноры Φ в выражении (4) для решений (6), (8) и (7), (9) соответственно имеют вид

$$\Phi = \begin{pmatrix} ik/|k| \\ \sqrt{\beta} \\ i\sqrt{\beta}k/|k| \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \beta < 3\,; \quad \Phi = \begin{pmatrix} ik/|k| \\ \sqrt{\beta} \\ -i\sqrt{\beta}k/|k| \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \beta > 1/3\,. \tag{10}$$

Найденные здесь поверхностные состояния специфичны именно для бесщелевого полупроводника. Гамильтониан (1) при $\gamma_1 + 2\gamma > 0$, $\gamma_1 - 2\gamma > 0$ описывает спектр легких и тяжелых дырок в валентной зоне обычного полупроводника типа Ge. Однако, как можно показать, в этом случае система уравнений (5) имеет только нулевое решение, так что поверхностных состояний вида (4) не существует.

В известных бесщелевых полупроводниках отношение масс $\beta < 1/3$. Поэтому в них возможны только поверхностные состояния электронного типа. Для HgTe, используя значение $\beta \approx 0{,}063$, получаем из формулы (8) $m_s \approx 2m_e$.

Отметим, что в магнитном поле, перпендикулярном поверхности, следует ожидать появления дискретных поверхностных уровней энергии, лежащих под каждой подзоной Ландау электронов.

Физико-технический институт
им. А.Ф.Иоффе
Академии наук СССР

Поступила в редакцию
9 декабря 1980 г.

Литература

[1] S.H.Groves, W.Paul. Phys. Rev.Lett., 11, 194, 1963.

[2] J.H.Luttinger. Phys. Rev., 102, 1030, 1956.