

©1995 г.

ИНТЕРФЕЙСНЫЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ ВБЛИЗИ ПЛАВНОГО ГЕТЕРОПЕРЕХОДА HgTe-CdTe

А.В.Германенко, Г.М.Миньков, В.А.Ларионова, О.Э.Рут

Институт физики и прикладной математики
при Уральском государственном университете,
620083, Екатеринбург, Россия

(Получена 31 августа 1994 г. Принята к печати 31 октября 1994 г.)

Анализируется влияние ширины гетероперехода в структурах HgTe-CdTe на спектр двумерных интерфейсных состояний. Показано, что уширение гетероперехода улучшает условия локализации таких состояний, понижая их энергию.

Метод огибающих (см. обзор [1] и ссылки в нем), широко используемый для расчетов зонной структуры низкоразмерных систем в полупроводниках, применяется и для описания энергетического спектра гетероструктур на основе бесщелевых, узкощелевых и широкозонных полупроводников [2-4]. Если граница раздела двух материалов резкая, т.е. изменение энергий краев зон происходит скачкообразно, то дисперсионное уравнение в этом методе получается из условия сшивания огибающих волновых функций на границе. В рамках такого подхода получается чрезвычайно важный результат: вблизи границы двух полупроводников при определенных условиях могут существовать так называемые интерфейсные состояния.¹

В реальных структурах вследствие диффузии компонент гетеропереход в той или иной степени является плавным. Эта ситуация для полупроводников, спектр которых описывается гамильтонианом Дирака, была рассмотрена в работе [6], в которой было показано, что интерфейсные состояния существуют и в плавном гетеропереходе. Для полупроводников с кейновским спектром роль конечной ширины перехода рассмотрена в работе [7]. Авторы проанализировали спектр интерфейсных состояний в гетероструктуре на основе полупроводников с шириной запрещенной зоны $E_g > 0$. В этой работе было получено аналитическое решение при выполнении условия $k_x d \ll 1$ (где k_x — компонента квазиимпульса вдоль гетероперехода, d — ширина гетероперехода). Для гетероструктуры типа HgTe-CdTe, когда полупроводники имеют E_g разного знака, это условие оказывается слишком

¹ Впервые существование такого рода состояний на поверхности бесщелевого полупроводника было предсказано в работе [5].

жестким. Как будет показано далее именно при больших k_x проявляются существенные особенности в спектре интерфейсных состояний, которые могут оказаться важными при анализе экспериментальных результатов.

Пусть граница между двумя материалами расположена в плоскости xy . Для описания спектра будем использовать эффективный гамильтониан Кейна в изотропном приближении, учитывающий зону Γ_6 и зону легких частиц Γ_8 (электронов в бесщелевом полупроводнике и легких дырок в широкозонном). Эффективную массу тяжелых дырок будем полагать бесконечной, что является хорошим приближением при описании спектра легких частиц. Будем считать, что волновой вектор, описывающий движение в плоскости гетероперехода имеет только x -компоненту, что упрощает задачу, не нарушая общности. При таком выборе системы координат уравнение Шредингера представляет собой две независимых системы дифференциальных уравнений, описывающих две группы невзаимодействующих состояний, отличающихся проекцией полного момента на ось z . Уравнение Шредингера для одной из групп состояний имеет вид

$$\begin{pmatrix} E_{\Gamma_6}(z) & \sqrt{\frac{2}{3}}P(\hat{k}_z + ik_x/2) & iPk_x/\sqrt{2} \\ \sqrt{\frac{2}{3}}P(\hat{k}_z - ik_x/2) & E_{\Gamma_8}(z) & 0 \\ -iPk_x/\sqrt{2} & 0 & E_{\Gamma_8}(z) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \varphi_3 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \varphi_1 \\ \varphi_2 \\ \varphi_3 \end{pmatrix}, \quad (1)$$

где E_{Γ_6} , E_{Γ_8} — энергии краев зон, являющиеся функциями координаты z , P — межзонный матричный элемент оператора импульса, который мы предполагаем независимым от материала, $\hat{k}_z = -i\partial/\partial z$. При записи (1) мы учли, что зависимость волновой функции от x описывается экспонентой $\exp(ik_x x)$. В дальнейшем все обозначения, относящиеся к состояниям, описываемым уравнением (1), мы будем снабжать верхним индексом U . Гамильтониан второй группы состояний, который будет соответствовать верхний индекс L , получается заменой в (1) $k_x \rightarrow -k_x$. Для нахождения двумерных состояний на волновые функции должны быть наложены соответствующие граничные условия. Поскольку по обе стороны гетероперехода энергия краев зон не зависит от координаты, при $z < -\delta/2$ и $z > \delta/2$ компоненты волновой функции должны экспоненциально спадать с расстоянием как

$$\begin{aligned} \varphi^U(z \leq -\delta/2) &\propto \begin{pmatrix} E - E_{\Gamma_6}^l \\ \sqrt{\frac{2}{3}}P(\kappa^l - ik_x/2) \\ -iPk_x/\sqrt{2} \end{pmatrix} \exp(\kappa^l z), \\ \varphi^U(z \geq \delta/2) &\propto \begin{pmatrix} E - E_{\Gamma_8}^r \\ \sqrt{\frac{2}{3}}P(\kappa^r - ik_x/2) \\ -iPk_x/\sqrt{2} \end{pmatrix} \exp(-\kappa^r z), \end{aligned} \quad (2)$$

где $\kappa^{l,r} = [k_x^2 - 3(E - E_{\Gamma_6}^{l,r})(E - E_{\Gamma_8}^{l,r}/2P^2)]^{1/2}$, а $E_{\Gamma_6}^{l,r}$, $E_{\Gamma_8}^{l,r}$ — энергии краев соответствующих зон слева и справа от переходной области. Анало-

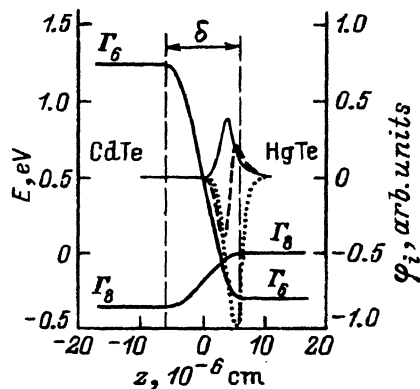


Рис. 1. Энергетическая диаграмма гетероперехода CdTe-HgTe и поведение компонент волновой функции φ_1^U (сплошная линия), $-i\varphi_2^U$ (штриховая), $-i\varphi_3^U$ (пунктирная) при $k_x = 10^6 \text{ см}^{-1}$.

гично можно записать граничные условия для функции φ^L , заменив k_x на $-k_x$.

Из уравнения (1) видно, что поскольку при сделанных приближениях третье уравнение вообще не содержит члена с производной, то задача сводится к задаче на собственные значения системы двух обыкновенных дифференциальных уравнений для первой и второй компонент волновой функции φ_1 и φ_2 . Поставленная задача решалась методом численного интегрирования. Критерием того, что энергия E является собственным значением системы, служило условие, что по обе стороны от гетероперехода должно выполняться соотношение φ_1/φ_2 , определяемое (2). В расчетах использовалось несколько моделей переходной области $|z| < \delta/2$. В соответствии с выводами [7,8] основные результаты оказываются слабо чувствительными к конкретному виду переходной области, поэтому в дальнейшем мы анализируем лишь результаты, полученные для одного случая, когда в этой области изменение энергии краев зон в направлении z описывается синусом (рис. 1). При расчетах были использованы параметры, соответствующие гетеропереходу HgTe-CdTe: $E_g(\text{HgTe}) = -0.3 \text{ эВ}$, $E_g(\text{CdTe}) = 1.6 \text{ эВ}$, $P = 8.4 \cdot 10^{-8} \text{ эВ} \cdot \text{см}$ и величина разрыва зоны Γ_8 , равная 0.36 эВ [9].

Анализ показал, что при тех значениях δ , которые реализуются при современной технологии изготовления структур (порядка 10 \AA), результаты наших расчетов и результаты [8,10], полученные из условий шивания волновых функций на резкой гетерогранице, практически совпадают. Вблизи границы раздела, при энергиях, близких к энергии электронов в бесщелевом полупроводнике, существует зона двумерных интерфейсных состояний. Дно этой зоны совпадает с дном зоны проводимости бесщелевого полупроводника, а закон дисперсии и зависимость эффективной массы от энергии оказываются близкими к соответствующим зависимостям электронов в бесщелевом материале (рис. 2). Одной из особенностей этих состояний в гетеропереходе HgTe-CdTe является то, что они существуют лишь при значениях волнового вектора k_x , меньших некоторого критического значения k_c . Другая особенность заключается в том, что интерфейсные состояния образуют только состояния φ^U . Состояния второй группы φ^L не образуют локализованных у гетероперехода состояний. В этом смысле интерфейсные состояния являются «односпиновыми».

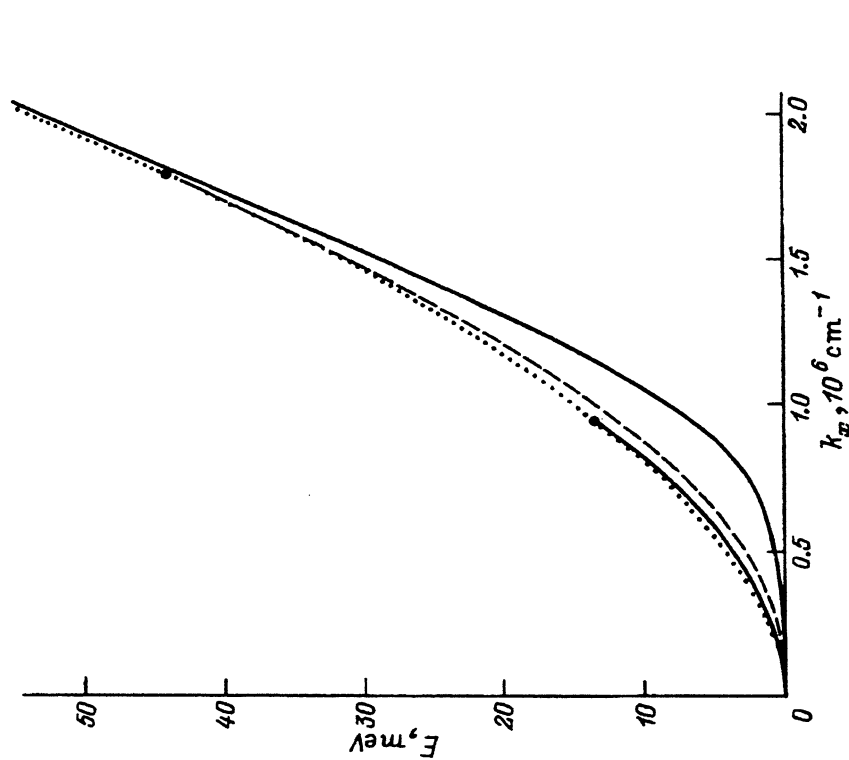


Рис. 2. Закон дисперсии двумерных интерфейсных состояний при $\delta = 3 \cdot 10^{-6}$ см (штриховая линия) и $\delta = 1.2 \cdot 10^{-5}$ см (сплошные кривые, соответствующие двум «спиновым» состояниям). Пунктирная кривая — закон дисперсии электронов в объеме бесщелевого полупроводника. Точки соответствуют значениям k_x , при которых интерфейсные состояния исчезают.

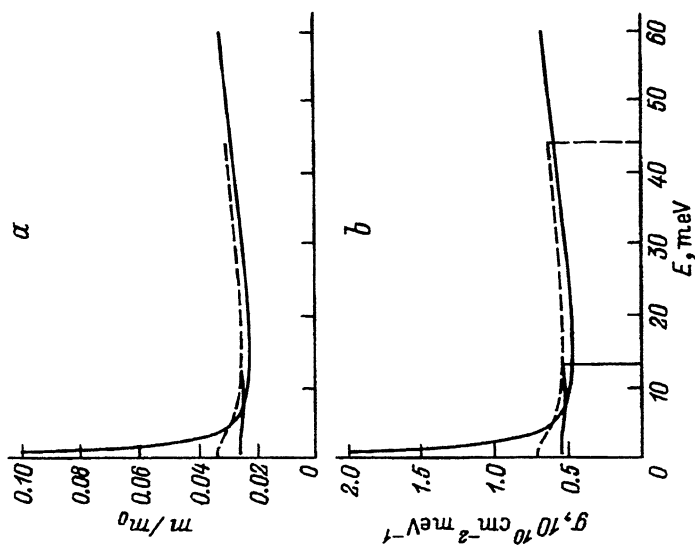


Рис. 3. Зависимость эффективной массы (а) и плотности состояний (b) от энергии. Параметры и типы кривых те же, что и на рис. 2. Скачок плотности состояний до нуля соответствует исчезновению интерфейсных состояний при $k_x = k_c$.

С увеличением ширины переходной области энергия этих состояний при фиксированном значении k_x уменьшается, а критическое значение k_c увеличивается. Таким образом, уширение гетероперехода приводит к уменьшению области локализации электронов. При некотором значении δ «притяжение» к интерфейсу становится настолько сильным, что появляются интерфейсные состояния φ^L (рис. 2). При этом закон дисперсии состояний φ^U вблизи дна зоны претерпевает значительные изменения, что, как видно из рис. 3, приводит к резкому увеличению эффективной массы $m = \hbar^2 k(\partial E/\partial k)^{-1}$ и плотности состояний при малых энергиях.

В заключение хотелось бы сделать два замечания. В расчетах не учитывались эффекты, связанные с заполнением двумерных интерфейсных состояний. Если уровень Ферми в гетероструктуре расположен при тех энергиях, где существуют эти состояния, то их заполнение электронами приведет к появлению избыточного заряда вблизи гетероперехода и появлению электростатического потенциала. Однако, как было показано, конкретный вид гетероперехода слабо влияет на интерфейсные состояния, поэтому можно ожидать, что появление дополнительного электростатического потенциала в области перехода также не должно оказать на них сильного влияния. Кроме того, как показывает анализ и как это видно из рис. 3, второе «спиновое» состояние появляется при довольно большой ширине переходной области $\delta \sim 10^{-5}$ см, поэтому эффекты, связанные с его появлением, могут проявляться только в специально приготовленных для этих целей структурах со столь плавным гетеропереходом.

Список литературы

- [1] D.L. Smith, C. Maihiot. Rev. Mod. Phys., **62**, 173 (1990).
- [2] Y.R. Lin-Liu, L.J. Sham. Phys. Rev. B, **32**, 5561 (1985).
- [3] P.A. Сурис. ФТП, **20**, 2008 (1986).
- [4] L.G. Gerdhikov, A.V. Subashiev. Phys. Sol. (b), **160**, 443 (1990).
- [5] Б.А. Волков, О.А. Панкратов. Письма ЖЭТФ, **42**, 145 (1985).
- [6] М.И. Демьянов, А.В. Хаецкий. Письма ЖЭТФ, **33**, 115 (1981).
- [7] А.В. Сокольский, P.A. Сурис. ФТП, **21**, 866 (1987).
- [8] М.В. Кисин. ФТП, **23**, 292 (1989).
- [9] N.F. Johnson, P.M. Hui, H. Ehrenreich. Phys. Rev. Lett., **61**, 1993 (1988).
- [10] Г.М. Миньков, О.Э. Рут, В.А. Ларионова, А.В. Германенко. ЖЭТФ, **105**, 719 (1994).

Редактор Т.А.Полянская

Interface electron states at the smooth heterojunction HgTe–CdTe

A.V.Germanenko, G.M.Min'kov, V.A.Larionova, O.E.Rut

Institute of physics and Applied Mathematics, Ural State University, 620083 Yekaterinburg, Russia

The energy spectrum of two-dimensional interface states at the smooth heterojunction HgTe–CdTe is considered. It is shown that the broadening of the transition region leads to decrease of their energy.