УДК 621.382

СТАТИЧЕСКИЕ СУПЕРСИММЕТРИЧНЫЕ СВЕРХРЕШЕТКИ

Б. А. Волков, Ю. В. Караганчу

Предложена периодическая структура на основе гетеропереходов между материалами с прямым и инверсным расположением зон. Получено выражение для энергетического спектра. Учтено влияние магнитного поля, работы выхода и смещения подрешеток.

В работах [1,2] были изучены электронные спектры приграничных состояний, которые возникают в полупроводниковых структурах с одиночной границей вследствие суперсимметричных свойств их гамильтониана.

В настоящей работе исследуются протяженные (в первую очередь периодические) суперсимметричные полупроводниковые структуры. Это сверхрешетки полупроводник—полупроводник и полупроводник—диэлектрик.

Условия суперсимметрии наиболее естественным образом могут быть реализованы в структурах на основе полупроводников A^4B^6 и их сплавов. Это связано с тем, что актуальный зонный спектр полупроводников этого класса может быть описан дираконодобным гамильтонианом, параметры которого (щель, спонтанная поляризация в сегнетоэлектрической фазе) легко изменяют свой знак при вариации внешних полей, температуры и конкретного химического состава. Эта особенность полупроводников A^4B^6 позволяет на их основе реализовать пространственно-неоднородные структуры, гамильтониан которых обладает нетривиальными топологическими свойствами, необходимыми для выполнения условий суперсимметрии.

Главная особенность суперсимметричных структур — появление в них особого рода приграничных электронных состояний (нулевой моды), устойчивых при произвольных изменениях параметров гамильтониана, если эти изменения не меняют топологии.

В работе [1] показано, что в случае одиночного контакта двух полупроводников с взаимно инвертированным расположением зон (знаки справа и слева от плоскости контакта противоположны) возникает нулевая мода в виде приграничных, не вырожденных по спину и безмассовых в плоскости контакта электронных состояний.

В настоящей работе показано, что в протяженных системах, в которых знак щели осциллирует в пространстве, спектр нулевой моды уже вырожден по спину, а его безмассовость требует выполнения определенного интегрального условия на пространственную зависимость щели.

В работе [2] исследовано влияние зависящей от координаты работы выхода на спектр одиночного инверсного контакта. Было найдено неунитарное преобразование, которое диагонализовало гамильтониан системы. Аналогичным преобразованием в данной работе диагонализован дираконодобный гамильтониан, описывающий систему, в которой как ширина запрещенной зоны, так и работа выхода являются периодическими функциями координаты. Условием применимости преобразования является требование одинаковой зависимости вышеуказанных величин от координаты. Полученные в результате диагонализации уравнения имеют суперсимметричный вид, т. е. содержат в виде потенциала квадрат и производную одной и той же функции.

Наконец, в настоящей работе определены электронные спектры обсуждаемых протяженных систем в магнитном поле.

1. Сверхрешетка из инверсных контактов

Теория возмущений. В целях изучения закономерностей спектра сверхрешетки из инверсных контактов рассмотрим уравнение вида

$$\begin{vmatrix} \Delta(z) & \hat{p}\hat{\sigma} \\ \hat{p}\hat{\sigma} & -\Delta(z) \end{vmatrix} \Psi = \varepsilon\Psi, \tag{1}$$

где $\Delta(z)$ — полуширина запрещенной зоны, являющаяся периодической функцией координаты; $\hat{p} = -i\hbar[v_\perp\partial/\partial x,\ v_\perp\partial/\partial y,\ v_\parallel\partial/\partial z]$ — оператор импульса; $v_{\parallel,\perp}$ — матричные элементы скорости вдоль и поперек плоскости контактов; $\hat{\sigma}$ — матрицы Паули; $\Psi = \begin{pmatrix}\chi_1\\ \chi_2\end{pmatrix}$; $\chi_{1,2}$ — биспиноры.

Отметим, что гамильтониан в эффективном уравнении Шредингера, получающемся из системы сцепленных уравнений (1) после операции квадрирования, обладает некоторой дополнительной симметрией, являющейся квантовомеханическим аналогом суперсимметрии в квантовой теории поля [3, 4]. Специфическая симметрия волнового уравнения вида

$$\hat{H}_S\chi_{1,2}(\hat{p}^2 + \Delta^2(z) \pm v_\parallel\hbar\hat{\sigma}_z\Delta'(z))\,\chi_{1,2} = \varepsilon^2\chi_{1,2} \tag{2}$$

обусловлена специальным видом потенциала, состоящего из суммы квадрата и производной одной и той же функции. Как и всякой иной квантовомеханической симметрии, ей соответствует коммутация гамильтониана $\hat{H}_S$ (левая часть уравнения (2)) с оператором некоторого преобразования [3]. Решение уравнения (1) с энергией, равной нулю, называется нулевой модой и имеет вид

$$\Psi^{\mp}_{(+)} = \frac{A}{2k_\perp}\begin{pmatrix} k_x - ik_y \\ \pm ik_\perp \\ \pm(k_y + ik_x) \\ k_\perp \end{pmatrix} \exp\left(\mp\frac{1}{\hbar v_\parallel}\int\limits_0^z \Delta(\zeta)\,d\zeta + i\mathbf{k}_\perp\mathbf{r}\right),$$

$$\Psi^{\mp}_{(-)} = \frac{A}{2k_\perp}\begin{pmatrix} -(k_x - ik_y) \\ \pm ik_\perp \\ \mp(k_y + ik_x) \\ k_\perp \end{pmatrix} \exp\left(\mp\frac{1}{\hbar v_\parallel}\int\limits_0^z \Delta(\zeta)\,d\zeta + i\mathbf{k}_\perp\mathbf{r}\right). \tag{3}$$

Данное решение существует при любом виде координатной зависимости суперпотенциала $\Delta(z)$, если только выполняется условие суперсимметрии

$$\left|\int\limits_0^z \Delta_\lambda(\zeta)\,d\zeta\right| < \infty \tag{4}$$

для всех z, которое обусловлено требованием ограниченности волновой функции (3).

Обладая точным решением уравнения (1) при выполнении условия (4), построим теорию возмущения для случая, когда периодическая координатная зависимость ширины запрещенной зоны не удовлетворяет условиям суперсимметрии. Представим $\Delta(z)$ в виде

$$\Delta(z) = \Delta_S(z) + c, \tag{5}$$

где $\Delta_S(z)$ — часть, удовлетворяющая условию (4); c — малая по отношению к амплитуде знакопеременной $\Delta_S(z)$ расстройка. Выберем волновую функцию вида

$$\Psi = \Phi(z)\, e^{i\mathbf{kr}}. \tag{6}$$

Подстановка (6) в уравнение (1) дает

$$(\hat{H} - \varepsilon)\Phi =$$
$$= \begin{vmatrix} \Delta_S + c - \varepsilon & 0 & \hat{p}_z + \hbar v_\parallel k_z & \hbar v_\perp (k_x - ik_y) \\ 0 & \Delta_S + c - \varepsilon & \hbar v_\perp (k_x + ik_y) & -\hat{p}_z - \hbar v_\parallel k_z \\ \hat{p}_z + \hbar v_\parallel k_z & \hbar v_\perp (k_x - ik_y) & -\Delta_S - c - \varepsilon & 0 \\ \hbar v_\perp (k_x + ik_y) & -\hat{p}_z - \hbar v_\parallel k_z & 0 & -\Delta_S - c - \varepsilon \end{vmatrix} \Phi = 0. \tag{7}$$

Выделяя суперсимметричную часть гамильтониана (7), перепишем уравнение в виде

$$(\hat{H}_S + \hat{U} - \varepsilon)\Phi = 0,$$

где $\hat{H}_S$ — суперсимметричный гамильтониан,

$$\hat{U} = \begin{vmatrix} c & 0 & \hbar v_\parallel k_z & \hbar v_\perp (k_x + ik_y) \\ 0 & c & \hbar v_\perp (k_x + ik_y) & -\hbar v_\parallel k_z \\ \hbar v_\parallel k_z & \hbar v_\perp (k_x - ik_y) & -c & 0 \\ \hbar v_\perp (k_x + ik_y) & -\hbar v_\parallel k_z & 0 & -c \end{vmatrix} \tag{8}$$

— матрица возмущения. Зная собственные волновые функции нулевой моды суперсимметричного гамильтониана, получаем в первом порядке теории возмущений двукратно вырожденный спектр сверхрешетки из инверсных контактов общего вида

$$\varepsilon(k_z, k_\perp) = \pm\sqrt{(c^2 + \hbar^2 v_\parallel^2 k_z^2)\exp(-2a/L) + \hbar^2 v_\perp^2 k_\perp^2}, \tag{9}$$

где a — период сверхрешетки, L — эффективная длина перекрытия волновых функций. Выражение (9) справедливо при малых значениях $k_z (\hbar^2 v_\parallel^2 k_z^2 < c^2)$. Следовательно, при учете отклонения координатной зависимости ширины запрещенной зоны от условия суперсимметрии (5) в спектре появляется щель, равная в точке $k_\perp = 0$ величине

$$2\sqrt{\exp(-2a/L)(c^2 + \hbar^2 v_\parallel^2 k_z^2)}, \tag{10}$$

которая экспоненциально стремится к нулю с увеличением периода сверхрешетки, т. е. в предельном случае бесконечно удаленных инверсных контактов решение (9) переходит в нулевую моду суперсимметричного гамильтониана.

В реальной системе необходимо учесть смещение подрешеток $\mathbf{u}$. Это приводит к появлению в уравнении (1) дополнительного возмущающего члена

$$\begin{vmatrix} 0 & -igu_z\sigma_z \\ igu_z\sigma_z & 0 \end{vmatrix}, \tag{11}$$

где g — константа электрон-фононного взаимодействия, u_z — величина смещения подрешеток. Полученный с учетом (11) в первом порядке теории возмущений спектр имеет вид

$$\varepsilon(k_z, k_\perp, u_z) = \pm\sqrt{(c^2 + \hbar^2 v_\parallel^2 k_z^2)\exp(-2a/L) + (\hbar v_\perp k_\perp \pm g u_z)^2}. \tag{12}$$

Таким образом, учет z-компоненты электрон-фононного взаимодействия приводит к снятию вырождения по спину. Общий вид спектра показан на рис. 1.

Переменная работа выхода. Метод сильной связи. Предположим, что неоднородная ширина запрещенной зоны

$\Delta(z)$ и работа выхода $\varphi(z)$ меняются по одному и тому же закону. Гамильтониан в уравнении (1) с учетом работы выхода имеет вид

$$\hat{H} = \begin{vmatrix} \Delta(z) + \varphi(z) & \hat{p}\hat{\sigma} \\ \hat{p}\hat{\sigma} & -\Delta(z) + \varphi(z) \end{vmatrix}. \tag{13}$$

После операции квадрирования гамильтониана (13) получаем уравнение

$$(\hat{H}^2 - \varepsilon^2)\Psi = \begin{vmatrix} \Delta^2(z) + \hat{p}^2 - (\varepsilon - \varphi(z))^2 & i\hbar v_\parallel \hat{\sigma}_z \nabla_z (\Delta - \varphi)' \\ -i\hbar v_\parallel \hat{\sigma}_z \nabla_z (\Delta + \varphi)' & \Delta^2(z) + \hat{p}^2 - (\varepsilon - \varphi(z))^2 \end{vmatrix} \Psi = 0. \tag{14}$$

Учитывая, что зависимости $\Delta(z) = \Delta_0 f(z)$ и $\varphi = \varphi_0 f(z)$ масштабоподобны ($f(z)$ — периодическая знакопеременная функция), осуществляем неунитарное преобразование [2] выражения (14) с матрицей преобразования

$$\hat{S} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} 1 & i(\Delta_0 - \varphi_0)/\sqrt{\Delta_0^2 - \varphi_0^2} \\ i(\Delta_0 + \varphi_0)/\sqrt{\Delta_0^2 - \varphi_0^2} & 1 \end{vmatrix}. \tag{15}$$

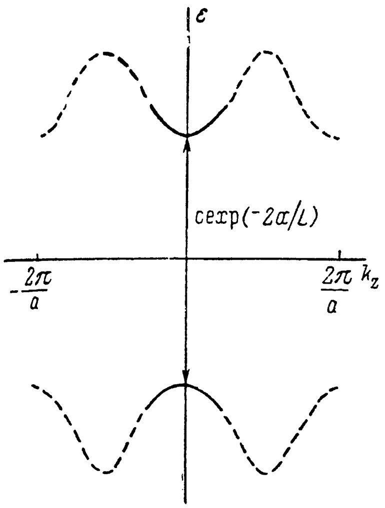

Рис. 1. Спектр сверхрешетки из инверсных контактов, полученный методом теории возмущений.

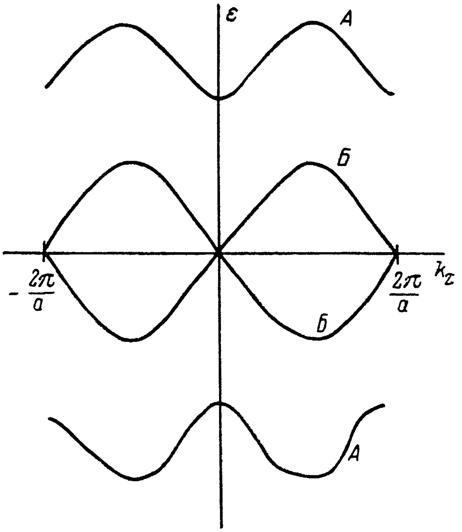

Рис. 2. Спектр сверхрешетки из инверсных контактов в приближении сильной связи.

Отметим, что преобразование (15), диагонализующее (14), применимо при условии

$$\Delta_0 > \varphi_0. \tag{16}$$

Таким образом, приводим уравнение (14) к суперсимметричной форме

$$\begin{vmatrix} \hat{p}^2 + W^2(z) - \hat{\sigma}_z W' & 0 \\ 0 & \hat{p}^2 + W^2(z) + \hat{\sigma}_z W' \end{vmatrix} \Psi = \varepsilon_1^2 \Psi, \tag{17}$$

где $W(z) = \sqrt{\Delta_0^2 - \varphi_0^2}\{f(z) + \varepsilon\varphi_0/(\Delta_0^2 - \varphi_0^2)\}$ — суперпотенциал; $\varepsilon_1^2 = \varepsilon^2\Delta_0^2/(\Delta_0^2 - \varphi_0^2)$. Далее предположим, что $f(z)$ имеет вид

$$f(z) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \left(\operatorname{th}\frac{z - na}{\xi_1} - \operatorname{th}\frac{z - na + b}{\xi_2} \right), \tag{18}$$

где a, b, ξ_1, ξ_2 — константы; $2n$ — число контактов в сверхрешетке. Выберем волновую функцию периодической структуры в виде

$$\Phi = \frac{A}{\sqrt{n}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \sum_n \Psi(x, y, z - na) \exp(ikna + ik_\perp r),$$

$$\Psi(x, y, z) = \exp\left(-\frac{\sqrt{\Delta_0^2 - \varphi_0^2}}{\hbar v_\parallel} \xi_1 \ln 2 \operatorname{ch} \frac{z}{\xi_1} - \frac{\varepsilon\varphi_0 z}{\hbar v_\parallel (\Delta_0^2 - \varphi_0^2)}\right), \tag{19}$$

A — нормировочный коэффициент. Используя волновую функцию (19) и учитывая перекрытие волновых функций на ближайших узлах, получаем в приближении сильной связи следующее выражение для спектра:

$$\varepsilon(k_z, k_\perp) = \pm \left(\frac{\Delta_0^2 - \varphi_0^2}{\Delta_0^2}\right)^{1/2} \sqrt{J_1 - J_2 \cos k_z a + \hbar^2 v_\perp^2 k_\perp^2}, \tag{20}$$

$$J_1 = 2(\Delta_0^2 - \varphi_0^2) \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^2(z) \left(\operatorname{th} \frac{z+b}{\xi_2} + \operatorname{th} \frac{z-a+b}{\xi_2}\right) \operatorname{th} \frac{z}{\xi_1} dz,$$

$$J_2 = (\Delta_0^2 - \varphi_0^2) \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(z) \Psi(z-a) \left(1 + \operatorname{th} \frac{z-a+b}{\xi_2}\right)^2 dz + \right.$$

$$\left. + \int_{-\infty}^{\infty} \Psi(z) \Psi(z-a) \left(\operatorname{th} \frac{z}{\xi_1} + \operatorname{th} \frac{z-a}{\xi_1}\right) \operatorname{th} \frac{z-a+b}{\xi_2} dz \right\}.$$

Разность $J_1 - J_2$ пропорциональна среднему значению $f(z)$ по периоду и экспоненциально стремится к нулю с его увеличением. Коэффициенты J_1 и J_2 равны при условии

$$a = b, \quad \xi_1 = \xi_2. \tag{21}$$

Таким образом, при выполнении условия (21), т. е. при равенстве нулю среднего значения $f(z)$ по периоду, спектр содержит нулевую моду. Если условие (21) не выполняется, т. е. среднее значение $f(z)$ по периоду отлично от нуля, в спектре появляется щель. Результаты, полученные методом сильной связи, полностью согласуются с результатами, полученными методом теории возмущений.

Энергетический спектр в приближении сильной связи представлен на рис. 2. Случай A соответствует выполнению условия (21). В случае $Б$ условие (21) нарушено. Отметим, что каждая из энергетических зон двукратно вырождена по спину.

2. Сверхрешетка из инверсных контактов в магнитном поле

Рассмотрим влияние магнитного поля на энергетический спектр сверхрешетки. Представим вектор-потенциал магнитного поля в такой форме

$$\mathbf{A} = (-Hy, 0, 0). \tag{22}$$

В этом случае уравнение Дирака будет иметь вид

$$\begin{vmatrix} \Delta(z) & (\hat{p}_x + \Omega v_\perp y)\sigma_x + \hat{p}_y\sigma_y + \hat{p}_z\sigma_z \\ (\hat{p}_x + \Omega v_\perp y)\sigma_x + \hat{p}_y\sigma_y + \hat{p}_z\sigma_z & -\Delta(z) \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{vmatrix} = \varepsilon \begin{vmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{vmatrix}, \tag{23}$$

где $\Omega = eH/c$. Разрешая систему уравнений (23) относительно χ_1, получаем квадрированное уравнение для χ_2

$$\{(\hat{p}_x + \Omega v_\perp y)^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2 + \Delta^2(z) + \hbar v_\parallel \Delta'(z)\sigma_z\} \chi_2 = \varepsilon^2 \chi_2, \tag{24}$$

которое дает следующее выражение для спектра:

$$\tilde{\varepsilon}(k_z, n) = \pm\sqrt{\varepsilon^2(k_z) + 2\hbar v_\perp^2 \Omega n}, \quad n = 0, 1, 2, 3 \ldots, \tag{25}$$

где $\varepsilon(k_z)$ — спектр сверхрешетки в отсутствие магнитного поля.

Таким образом, магнитное поле вида (22) приводит к стандартному расщеплению на уровни Ландау.

3. Обсуждение результатов

Следует отметить тот факт, что величины Δ, φ, $\mathbf{u}$ не являются независимыми. Для двухатомной кубической решетки типа NaCl с точностью до квадратичных членов функционал Ландау для плотности свободной энергии имеет вид

$$F = \alpha \mathbf{u}^2 + \gamma (\operatorname{div} \mathbf{u})^2 + \delta_1 (\varphi \operatorname{div} \mathbf{u} - \mathbf{u} \operatorname{grad} \varphi) + \delta_2 (\Delta \operatorname{div} \mathbf{u} - \mathbf{u} \operatorname{grad} \Delta) + e^* \mathbf{u} \mathbf{E}, \tag{26}$$

где α, γ, δ_1, δ_2 — коэффициенты; e^* — эффективный заряд решетки; три последних члена являются инвариантами типа Лифшица [5].

Стандартная вариационная процедура приводит к соотношению

$$\mathbf{u} = \frac{\delta_1}{2\alpha} \operatorname{grad} \Delta + \frac{\delta_2}{2\alpha} \operatorname{grad} \varphi + \frac{e^*}{2\alpha} \mathbf{E}. \tag{27}$$

Таким образом, в пространственно-неоднородной кристаллической структуре существование градиентов Δ и φ ввиду наличия в функционале плотности свободной энергии инвариантов типа Лифшица немедленно влечет смещение подрешеток $\mathbf{u}$. К тому же результату приводит и внешнее электрическое поле (поляризация). Очевидно, что для наиболее общего описания сверхрешетки в эффективный гамильтониан должны быть включены все виды взаимосвязанных неоднородностей. Однако эти вторичные неоднородности, индуцированные основной неоднородностью структуры в первом порядке теории возмущений, не изменяют полученные выше закономерности электронных спектров. Изучение решения общего вида усложняется тем, что матричные элементы электронной скорости могут зависеть от координаты. Подробно исследования подобной неоднородности не проводились, но при малой ее величине справедливо использовать теорию возмущений. Поэтому вывод о несущественном влиянии такой неоднородности легко проверяется. Как для случая индуцированных инвариантами типа Лифшица неоднородностей, так и для случая неоднородной скорости равенство нулю поправок первого порядка к спектрам связано с тем, что симметрия соответствующего возмущения противоположна симметрии волновых функций нулевой моды.

В заключение следует кратко обсудить возможные способы реализации инверсной сверхрешетки. Первый путь тривиален и представляет собой структуру полупроводник—полупроводник из чередующихся слоев с доинверсным и заинверсным составами. Вторая возможность — это структура полупроводник—туннельно прозрачный диэлектрик. В этом случае условия для возникновения суперсимметричного потенциала возникают на границе раздела двух сред при определенных граничных условиях [6].

Список литературы

[1] Волков Б. А., Панкратов О. А. // Письма в ЖЭТФ. 1985. Т. 42. № 4. С. 145—147.
[2] Pankratov O. A., Volkov B. A., Pachomov S. V. // Sol. St. Comm. 1987. V. 61. P. 93—96.
[3] Генденштейн Л. Э., Криве И. В. // УФН. 1985. Т. 146. № 4. С. 553—590.
[4] Фейгельман М. В., Цвелик А. М. // ЖЭТФ. 1982. Т. 83. № 10. С. 1430—1444.
[5] Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Статистическая механика. М.: Наука, 1964. С. 567.
[6] Волков В. А., Пинскер Т. М. // ФТТ. 1981. Т. 23. № 6. С. 1756—1759.

Физический институт им. П. Н. Лебедева
АН СССР
Москва

Поступило в Редакцию
17 января 1990 г.
В окончательной редакции
11 апреля 1990 г.