КВАНТОВЫЙ РАЗМЕРНЫЙ ЭФФЕКТ В УЗКОЩЕЛЕВЫХ И БЕСЩЕЛЕВЫХ ПОЛУПРОВОДНИКАХ

Кисин М. В., Петросян В. И.

Рассчитан электронный энергетический спектр двойной гетероструктуры, содержащей слой узкощелевого полупроводника. Для зонных моделей Кейна и Дирака (Диммока) показано, что положение подзон размерного квантования легких частиц и значения эффективных масс в подзонах сильно зависят от соотношения величин барьеров в валентной зоне и зоне проводимости. Найденные зависимости качественно различаются в рассматриваемых зонных моделях, описывающих два основных класса узкощелевых полупроводников. В твердых растворах HgCdTe в отличие от халькогенидов свинца размерное квантование приводит к сильному нарушению зеркальной симметрии спектра легких частиц даже в отсутствие смешивания состояний легких и тяжелых дырок.

Двойные гетероструктуры (квантовые ямы), содержащие тонкий слой узкощелевого полупроводника, перспективны для применений в ИК оптоэлектронике [1, 2]. Корректное описание спектра размерного квантования в таких гетероструктурах возможно лишь на основе многозонных кейновских моделей. Однако до сих пор нет ясного понимания тех особенностей квантового размерного эффекта в узкощелевых полупроводниках, к которым приводит учет многозонности волновой функции по сравнению, например, с традиционной картиной квантования спектра скалярной частицы в прямоугольной потенциальной яме. Как будет показано далее, такой особенностью является сильная зависимость параметров спектра размерного квантования от соотношения величин барьеров в валентной зоне и зоне проводимости, причем эти зависимости существенно различны в двух основных классах узкощелевых полупроводников: твердых растворах типа HgCdTe и соединениях на основе халькогенидов свинца.

Спектр носителей заряда в узкощелевых составах HgCdTe хорошо описывается трехзонной моделью Кейна, явно учитывающей зоны электронов, легких и тяжелых дырок. Гамильтониан модели представляет собой матрицу 6×6, подробно описанную, например, в работе [3]. Нас будут интересовать соединения, у которых ширина запрещенной зоны ε_g мала. В таких полупроводниках массы электронов m_c и легких дырок m_l малы, и если интересоваться квантованием спектра легких частиц, то зону тяжелых дырок можно считать плоской, полагая $m_h=\infty$. Действительно, в бесщелевом случае энергия квантования легких частиц имеет порядок $\varepsilon_l \sim P/d$, где P — межзонный матричный элемент импульса. В HgCdTe $P \sim 8$ эВ$\cdot$Å, и даже для толщин слоя d порядка десятка ангстрем $E_l \gg E_h \sim \hbar^2/2m_h d^2$, если m_h порядка массы свободного электрона. Таким образом, эффектами смешивания состояний легких и тяжелых дырок [4] в рассматриваемой ситуации можно пренебречь.

Направим ось x поперек слоя узкощелевого полупроводника, а ось y — вдоль двумерного волнового вектора K. Поскольку рассматриваемая структура обладает центром инверсии, уравнения трехзонной модели Кейна распадаются на две независимые системы в соответствии с двукратным вырождением спектра квантовой ямы. Ненулевые матричные элементы субматриц гамильтониана размерности 3×3 равны

$$H_{11}=\varepsilon_g, \quad H_{12}=H_{21}^*=\frac{P}{\sqrt{2}}(ik_x-K), \quad H_{13}=H_{31}^*=\frac{P}{\sqrt{6}}(ik_x+K). \tag{1}$$

Энергетический спектр носителей заряда в узкощелевых соединениях на основе халькогенидов свинца описывается гамильтонианом Диммока [5], сводящимся в сферическом приближении к известному гамильтониану Дирака. Последний также может быть приведен к блочно-диагональному виду [6] с субматрицами размерности 2×2, содержащими ненулевые элементы,

$$H_{11}=\varepsilon_g, \quad H_{12}=H_{21}^*=P\,(ik_x+K). \tag{2}$$

Спектр легких частиц в моделях (1), (2) описывается выражением

$$\varepsilon_{c,\,l}=\frac{\varepsilon_g}{2}\pm\sqrt{\left(\frac{\varepsilon_g}{2}\right)^2+\alpha^2P^2\,(K^2+k^2)}. \tag{3}$$

Здесь k — поперечная компонента волнового вектора, $\alpha=\sqrt{2/3}$ в модели Кейна и $\alpha=1$ в модели Дирака. Знаки плюс и минус здесь и далее относятся соответственно к электронам и легким дыркам. Отсчет энергии ведется от потолка валентной зоны узкощелевого полупроводника, а для полупроводников с инверсной зонной структурой ($\varepsilon_g<0$) — от дна зоны проводимости.

В данной работе нас будут интересовать особенности квантового размерного эффекта, связанные с многозонным характером волновой функции электрона в моделях (1) и (2). Для простоты анализа разрывы зон Δ_c и Δ_v на гетерогранищах будем считать прямоугольными, не учитывая влияния объемного заряда и электрон-электронного взаимодействия на формирование спектра носителей заряда в яме. В этом приближении задача сводится к определению условий существования локализованных решений уравнения Шредингера $H_{ij}\Psi_j=\varepsilon\Psi_i$ с гамильтонианом (1) или (2). Такое решение, затухающее в объеме широкозонного полупроводника, может быть построено как линейная комбинация частных решений $\psi_{K,\,D}\exp i\,(kx+Ky)$, матричная структура которых для моделей Кейна и Дирака имеет вид

$$\begin{aligned}\psi_K&=\left(2\varepsilon/\alpha P,\ -\sqrt{3}\,(K+ik),\ K-ik\right),\\ \psi_D&=(\varepsilon/\alpha P,\ \ K-ik).\end{aligned} \tag{4}$$

Для определения коэффициентов линейной комбинации необходимо сформулировать граничные условия для компонент волновой функции Ψ_i. Эти условия могут быть получены из требования непрерывности потока вероятности через гетерограницу. Если предположить, что параметр P одинаков в узкозонном и широкозонном материалах, то, интегрируя уравнение Шредингера через границу, получим условие непрерывности величин Ψ_1 и Ψ_2 в модели Дирака, Ψ_1 и $\sqrt{3}\Psi_2+\Psi_3$ в модели Кейна. Последнее условие может быть также получено из граничных условий работы [7] в пределе большого спин-орбитального расщепления валентной зоны. Поскольку моделям (1) и (2) соответствуют дифференциальные уравнения первого порядка, найденных граничных условий достаточно для сшивки волновых функций на гетерогранице. Дисперсионное уравнение для решений в яме получается из условий сшивки элементарным образом и имеет вид

$$\exp\,(2ikd)=z/z^*, \quad z=(\lambda\varepsilon-ikE)^2-\beta\Delta_v^2K^2, \tag{5}$$

где $E=\varepsilon+\Delta_v$; $\beta=1$ в модели Дирака и $\beta=1/4$ в модели Кейна. Величина $\lambda=\sqrt{K^2+E\,(E_g-E)/(\alpha P)^2}$ есть декремент затухания волновой функции в широкозонном материале с шириной запрещенной зоны E_g. Заметим, что область энергий $\varepsilon\sim0$ уравнением (5) не описывается, поскольку дисперсией тяжелых дырок мы пренебрегаем.

Совместное решение уравнений (5) и (3) дает нам положение и вид N электронных и дырочных подзон размерного квантования легких частиц в соответствии с N решениями трансцендентного уравнения (5). Систематику подзон удобно ввести, исходя из «однозонной» ситуации $\varepsilon_g\gg P/d$. Если барьеры в соответствующей зоне достаточно велики, то при $K=0$ получим обычные условия квантования $k_N d=N\pi$. Считая k действительной величиной, перепишем (5) в виде

$$kd = N\pi - \operatorname{arcctg}\left(\frac{\varepsilon\lambda}{Ek} - \frac{kE}{\varepsilon\lambda} - \frac{3K^2\Delta_r^2}{k\lambda\varepsilon E}\right). \tag{6}$$

Уравнение (6) позволяет качественно понять характер перестройки спектра размерного квантования при переходе к «многозонной» ситуации. Пусть для простоты $K=0$, а разрывы зон на гетерогранице велики и симметричны $\Delta_c \simeq \Delta_v \gg P/d$. Тогда, например, в зоне проводимости при $\varepsilon_g \gg P/d$ имеем $\varepsilon \sim \varepsilon_g$ и $k_N d \simeq N\pi$. Если же $\varepsilon_g \sim 0$, то $k_N d \simeq (N - {}^1/_2)\pi$, но при этом для несимметричных разрывов зон величина k_N будет сильно зависеть от соотношения Δ_c и Δ_v, а также от величины K. При $\varepsilon_g < 0$ на параболическом участке спектра имеем $\varepsilon \simeq k^2P^2/|\varepsilon_g|$ и $k_N d \simeq (N-1)\pi$ в соответствии с результатами работы [8].

Ограничимся на дальнейшее случаем $\varepsilon_g \sim 0$ и $N=1$, где зависимость спектра от параметров гетерограницы наиболее сильна. В случае достаточно широкой (глубокой) ямы, когда $\Delta_{c,v} \gg P/d$, из (6) можно получить аналитическое выражение для эффективных масс электронов и дырок на дне первой подзоны

$$m_{c,l} = \frac{k}{aP}\left[1 \pm \frac{2}{kd}\sqrt{t(1-t)}\,(1-2\beta t)\right]^{-1}. \tag{7}$$

Здесь

$$kd = \left(N - \frac{1}{2}\right)\pi \pm \operatorname{arctg}\frac{1}{2}\left(\sqrt{\frac{1-t}{t}} - \sqrt{\frac{t}{1-t}}\right), \quad t = \frac{\Delta_r}{E_g}. \tag{8}$$

Из (8) видно, что в бесщелевых полупроводниках положение дна N-й подзоны проводимости зависит от величины барьера в валентной зоне, и наоборот. С увеличением разрыва в «противоположной» зоне уровни размерного квантования стремятся занять положение уровня с номером на единицу меньше. Интересно, что эффективные массы (7) ведут себя при этом по-разному в моделях Кейна и Дирака.

В модели Дирака электроны утяжеляются и при $\Delta_c \ll \Delta_v$

$$m_{cD} \simeq \frac{3}{4Pd}\sqrt{\frac{E_g}{\Delta_c}}, \tag{9}$$

а дырки ведут себя таким же образом при $\Delta_v \ll \Delta_c$ в соответствии с соотношением

$$m_{vD}(1-t) = m_{cD}(t), \tag{10}$$

следующим из (7), при $\beta=1$. В модели Кейна дырки также утяжеляются при $\Delta_v \ll \Delta_c$

$$m_{vK} \simeq \frac{12}{7Pd}\sqrt{\frac{3E_g}{2\Delta_v}}, \tag{11}$$

но равенство (10) уже не выполняется, и при $\Delta_c \ll \Delta_v$ электроны, наоборот, становятся легче

$$m_{cK} \simeq \frac{4}{3Pd}\sqrt{\frac{3\Delta_c}{2E_g}}. \tag{12}$$

Если величина разрыва больше в той зоне, где расположен исследуемый уровень, то в модели Дирака для электронов получим

$$m_c aPd \simeq \pi - 4\sqrt{\Delta_v/E_g}. \tag{13}$$

Масса дырок при этом ведет себя в соответствии с (10). В модели Кейна для массы электронов также справедливо выражение (13), а для дырок в случае большого барьера в валентной зоне имеем

$$m_{vK} aPd \simeq \pi - \sqrt{\Delta_c/E_g}. \tag{14}$$

На рис. 1 непрерывными линиями показаны значения эффективных масс электронов и дырок в первой подзоне, рассчитанные по формулам (7) и (8).

Точками нанесены результаты решения полного дисперсионного уравнения (5), учитывающие конечную толщину слоя бесщелевого полупроводника. На рис. 2 показана зависимость отношения масс электронов и дырок в первой подзоне от величины разрывов зон. В модели Дирака при $\Delta_c = \Delta_v$ это отношение равно единице в соответствии с (10). При этом отношение масс носителей заряда слабо зависит от ширины запрещенной зоны ε_g узкощелевого полупроводника. Напротив, в модели Кейна размерное квантование при $\varepsilon_g = 0$ сильно нарушает зеркальную симметрию спектра легких частиц, поэтому отношение масс электронов и дырок в первой подзоне существенно зависит от ε_g (рис. 2). Отметим, что при дальнейшем увеличении ε_g восстановлению симметрии спектра легких частиц будет препятствовать смешивание состояний легких и тяжелых дырок [4].

Дисперсионное уравнение (5) может иметь мнимые решения $k = iq$. Волновая

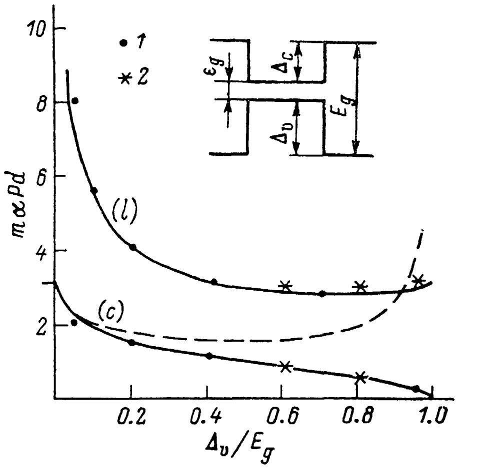

Рис. 1. Эффективные массы носителей заряда в первой подзоне размерного квантования в моделях Кейна (сплошные кривые) и Дирака (штриховая).

$\varepsilon_g = 0$, $P/\alpha \ll \Delta_{c,v}$. Точками нанесены значения масс для конечной толщины слоя HgCdTe d, Å: 1 — 150, 2 — 60. На вставке — энергетическая диаграмма двойной гетероструктуры.

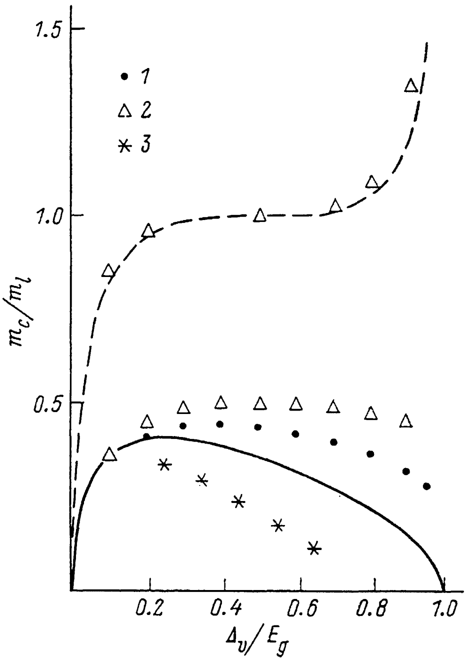

Рис. 2. Отношение эффективных масс легких частиц в моделях Кейна (сплошная кривая) и Дирака (штриховая) при $\varepsilon_g = 0$.

ε_g/E_g: 1 — 0.02, 2 — 0.04, 3 — −0.02.

функция такого решения локализована вблизи границ квантовой ямы и при увеличении толщины ямы d переходит в комбинацию пограничных состояний отдельных гетеропереходов [7]. Для интересующего нас случая узкощелевых и бесщелевых полупроводников с линейным спектром, полагая в (5) $\varepsilon \simeq \alpha kP$ и $k = iq \to 0$, находим уравнение для критического значения K_0, при котором состояния в квантовой яме становятся пограничными,

$$\frac{1}{2} K_0 d \left[\delta_c \delta_v + K_0 (\delta_c - \delta_v)\right]^{-1/2} \left[\delta_v - \delta_c - \frac{(1-\beta)\,\delta_v^2}{\delta_v + K_0}\right] = 1. \tag{15}$$

Здесь $\delta_{c,v} = \Delta_{c,v}/\alpha P$, положительные решения K_0 соответствуют возникновению пограничных состояний в зоне проводимости, а отрицательные — в валентной зоне. В модели Дирака решение имеет вид

$$K_0 d = \frac{2}{(\delta_v - \delta_c)\, d} \left(\sqrt{1 + \delta_c \delta_v d^2} - 1\right). \tag{16}$$

При симметричных разрывах зон $K_0 \to \infty$ и пограничные состояния не образуются ни при каких K. Напротив, в случае модели Кейна уравнение (15) всегда имеет конечное решение K_0, и при достаточно больших K состояния первой подзоны размерного квантования являются пограничными либо в зоне проводимости, либо в валентной зоне.

В заключение отметим, что экспериментальное исследование параметров спектра размерного квантования может оказаться полезным для установления величины разрывов зон на гетерогранице. Действительно, как видно из рис. 1 и 2, в области $\Delta_v/E_g \leqslant 0.2$ эффективные массы легких частиц достаточно слабо зависят от толщины d слоя узкощелевого полупроводника и от состава твердого раствора (ширины запрещенной зоны ε_g). При этом отношение m_c/m_l сильно зависит от величины разрыва валентной зоны Δ_v, значение которой в соединениях HgCdTe до настоящего времени является предметом дискуссии [9].

Литература

[1] Валейко М. В., Засавицкий И. И., Матвеенко А. В., Мацонашвили Б. И., Саксеев Д. А. — ФТП, 1987, т. 21, в. 1, с. 57—62.
[2] Kinch M. A., Goodwin M. W. — J. Appl. Phys., 1985, v. 58, N 11, p. 4455—4458.
[3] Гельмонт Б. Л. — ЖЭТФ, 1978, т. 75, в. 2 (8), с. 536—544.
[4] Дьяконов М. И., Хаецкий А. В. — ЖЭТФ, 1982, т. 82, в. 5, с. 1584—1590.
[5] Dimmock J. — J. Phys. Chem. Sol., 1971, v. 32 (Suppl.), N 1, p. 319—330.
[6] De Dios Leiva M., Alvarez R. P., Gondar J. L. — Phys. St. Sol., 1984, v. B125, N 1, p. 221—228.
[7] Сурис Р. А. — ФТП, 1986, т. 20, в. 11, с. 2008—2014.
[8] Кисин М. В., Петросян В. И. — ФТП, 1987, т. 21, в. 2, с. 279—283.
[9] Kowalczyk S. P., Chcung J. T., Kraut E. A., Grant R. W. — Phys. Rev. Lett., 1986, v. 56, N 15, p. 1605—1608.

Институт радиотехники
и электроники АН СССР
Саратовский филиал

Получена 18.06.1987
Принята к печати 23.10.1987