

## ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР НОСИТЕЛЕЙ, ОПИСЫВАЕМЫХ МОДЕЛЬЮ ДИРАКА, В КВАНТОВОЙ ЯМЕ

Дугаев В. К., Петров П. П.

Получены дисперсионное уравнение и волновые функции для двумерных электронных состояний в квантовой яме, образованной полупроводниками с зонным спектром дираковского типа. Положение уровней и эффективная масса для движения в плоскости ямы существенно зависят как от энергетической структуры ямы, так и от величины межзонного взаимодействия.

Электронная структура полупроводников с квантовыми ямами и сверхрешетками [1] привлекает значительное внимание в связи с рядом уникальных электрических и оптических свойств таких систем [2]. Так, сверхрешетки на основе узкощелевых полупроводников типа HgTe—CdTe, PbTe—Pb<sub>1-x</sub>Sn<sub>x</sub>Te представляют интерес с точки зрения их применения в качестве оптических приборов [3, 4].

Следует отметить, что энергетический спектр электронов в квантовых ямах в узкощелевых полупроводниках исследован явно недостаточно. В особенности это относится к полупроводникам A<sup>IV</sup>B<sup>VI</sup> и их твердым растворам (например, PbTe—Pb<sub>1-x</sub>Sn<sub>x</sub>Te), для которых в основном проведены расчеты в однозонном приближении с зависящими от координаты эффективной массой  $m(x)$  и возмущающим потенциалом  $V(x)$  [5-8]. В [6, 7] проделаны численные расчеты положения края зоны от толщины слоев в сверхрешетке в однозонном приближении с потенциалом типа Кронига—Пенни, который периодически возмущает эффективную массу носителей. Результаты расчета энергетического спектра приведены также в [8] (метод огибающих функций предложен и детально разработан в [9-14]).

Использованные в указанных работах методы имеют ограниченную область применимости, в частности они не пригодны для составов вблизи точки инверсии зон, когда величина запрещенной зоны стремится к нулю. Расчеты энергетического спектра в двухзонном приближении в рамках модели Дирака, которая достаточно хорошо описывает зонные состояния в соединениях A<sup>IV</sup>B<sup>VI</sup> при не слишком больших энергиях, проведены в [15] для некоторого специфического случая инверсного контакта. Отметим, что эта модель в дальнейшем интенсивно исследовалась [16-22], поскольку в ней были обнаружены удивительные свойства, связанные с наличием киральной аномалии [23]. В [24] рассмотрен энергетический спектр электронов на единичном гетеропереходе в однозонной модели с возмущением эффективной массы.

В настоящей работе в рамках гамильтониана модели Дирака рассчитаны волновые функции и положение энергетических уровней в прямоугольной квантовой яме.

Уравнение Шредингера для дираковской частицы в потенциале, сводящемся к возмущению параметра энергетической щели  $\Delta(x)$ , имеет вид

$$\begin{pmatrix} \Delta_c(x) - \varepsilon & -iv\sigma V \\ -iv\sigma V & -\Delta_v(x) - \varepsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = 0, \quad (1)$$

где  $\Delta_c(x)$ ,  $\Delta_v(x)$  — положения границ зон (проводимости и валентной соответственно),  $v$  — параметр межзонного взаимодействия для рассматриваемой полупроводниковой системы (в случае дираковской частицы  $v$  есть скорость света), компонентами  $\sigma$  являются матрицы Паули,  $\varphi$  и  $\chi$  — спиноры,  $\hbar=1$ . Модельное поведение функций  $\Delta_c(x)$  и  $\Delta_v(x)$  показано на рис. 1. Параметр межзонного взаимодействия  $v$  предполагается не зависящим от состава, что вполне оправдано в данном случае.

В дальнейшем ограничимся рассмотрением области энергий  $\Delta < \varepsilon < \Delta_1$ ,  $\Delta_2$ , в которой имеет место размерное квантование.

Поскольку возмущение не зависит от координат  $y$  и  $z$ , волновую функцию в этих направлениях можно считать плоской волной. С учетом этого переищем (1) в виде

$$iv\sigma_x \left( \frac{d\Delta_v}{dx} \right) \chi + [(\Delta_c - \varepsilon)(\Delta_v + \varepsilon) + v^2 \left( k^2 - \frac{d^2}{dx^2} \right)] \varphi = 0, \quad (2)$$

$$iv\sigma_x \left( \frac{d\Delta_c}{dx} \right) \varphi - [(\Delta_c - \varepsilon)(\Delta_v + \varepsilon) + v^2 \left( k^2 - \frac{d^2}{dx^2} \right)] \chi = 0, \quad (3)$$

где  $k^2 = k_y^2 + k_z^2$ .

Рассмотрим решения уравнения (2). Принимая во внимание условие конечности вдали от ямы, волновую функцию ищем в виде

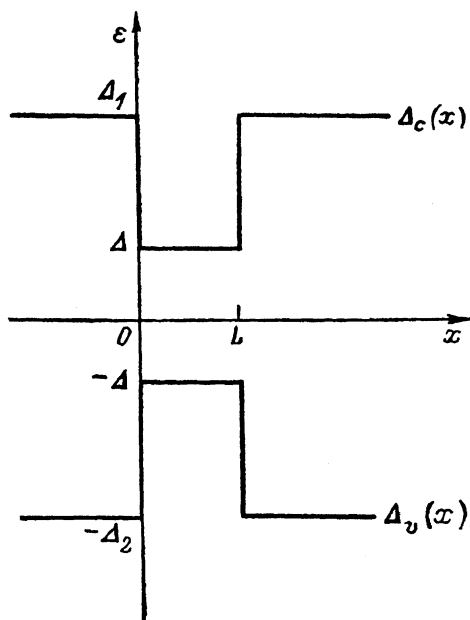


Рис. 1. Энергетическая структура квантовой ямы.

$$\varphi(x) = \begin{cases} A \exp(\kappa x), & x < 0, \\ B \exp(ipx) + C \exp(-ipx), & 0 < x < L, \\ D \exp[-\kappa(x-L)], & x > L, \end{cases} \quad (4)$$

где

$$\kappa = \frac{1}{v} [(\Delta_1 - \varepsilon)(\Delta_2 + \varepsilon) + k^2 v^2]^{1/2}, \quad (5)$$

$$p = \frac{1}{v} [\varepsilon^2 - \Delta^2 + k^2 v^2]^{1/2}. \quad (6)$$

Входящие в (4) множители  $A$ ,  $B$ ,  $C$  и  $D$  являются в общем случае спинорными матрицами.

Условия сшивки следуют из требования непрерывности волновой функции на стенках ямы. Согласно (2) и (3), производные  $\varphi$  и  $\chi$  на границах ямы терпят разрыв. Интегрируя (2) по малой окрестности вблизи  $x=0$  и учитывая непрерывность волновой функции, получим связь между коэффициентами  $A$ ,  $B$  и  $C$ :

$$B = \frac{A}{2} \left( 1 - i \frac{\kappa}{p} \right) + \frac{(\Delta - \Delta_2)}{2pv} \sigma_x \chi(0), \quad (7)$$

$$C = \frac{A}{2} \left( 1 + i \frac{\kappa}{p} \right) - \frac{(\Delta - \Delta_2)}{2pv} \sigma_x \chi(0). \quad (8)$$

Используя (7) и (8),  $\varphi(x)$  в области  $0 < x < L$  можно представить в виде

$$\varphi(x) = A \left( \cos px + \frac{\kappa}{p} \sin px \right) + i \frac{(\Delta - \Delta_2)}{pv} \sigma_x \chi(0) \sin px. \quad (9)$$

Аналогично интегрируя (2) по малой окрестности вблизи  $x = L$  и используя (4), (9), получаем

$$D = -A \left( \cos pL - \frac{p}{z} \sin pL \right) - i \frac{(\Delta - \Delta_2)}{zv} \sigma_x [\chi(0) \cos pL - \chi(L)], \quad (10)$$

что с учетом непрерывности волновой функции при  $x = L$  приводит к следующему условию самосогласования:

$$A \left[ 2 + \left( \frac{z}{p} - \frac{p}{z} \right) \operatorname{tg} pL \right] - i \frac{(\Delta - \Delta_2)}{zv \cos pL} \sigma_x \chi(L) + i \frac{(\Delta - \Delta_2)}{zv} \sigma_x \chi(0) \left( 1 + \frac{z}{p} \operatorname{tg} pL \right) = 0. \quad (11)$$

Выполняя аналогичные вычисления для компоненты  $\chi(x)$ , запишем только окончательные выражения

$$\chi(x) = \begin{cases} A' \exp(\lambda x), & x < 0, \\ A' \left( \cos px + \frac{z}{p} \sin px \right) - i \frac{(\Delta - \Delta_1)}{pv} \sigma_{x\varphi}(0) \sin px, & 0 < x < L, \\ \left[ -A' \left( \cos pL - \frac{p}{z} \sin pL \right) - i \frac{(\Delta - \Delta_1)}{zv} \sigma_{x\varphi}(L) + \right. \\ \left. + i \frac{(\Delta - \Delta_1)}{zv} \sigma_{x\varphi}(0) \cos pL \right] \exp[-z(x - L)], & x > L. \end{cases} \quad (12)$$

Соответственно вместо (11) имеем

$$A' \left[ 2 + \left( \frac{z}{p} - \frac{p}{z} \right) \operatorname{tg} pL \right] + i \frac{(\Delta - \Delta_1)}{zv \cos pL} \sigma_{x\varphi}(L) - i \frac{(\Delta - \Delta_1)}{zv} \sigma_{x\varphi}(0) \left( 1 + \frac{z}{p} \operatorname{tg} pL \right) = 0. \quad (13)$$

Выражения для  $\varphi(0)$ ,  $\varphi(L)$ ,  $\chi(0)$  и  $\chi(L)$  могут быть получены из (9) и (12). Их подстановка в (11) и (13) приводит к дисперсионному уравнению

$$(\Delta_1 - \Delta)(\Delta_2 - \Delta) + v^2(p^2 - z)^2 = \frac{2\kappa p v^2}{\operatorname{tg} pL}, \quad (14)$$

решения которого при  $k=0$  определяют положение энергетических уровней в квантовой яме в зависимости от параметров зонного спектра ( $\Delta_1$ ,  $\Delta_2$ ,  $v$ ) и ямы ( $\Delta$ ,  $L$ ).

В общем случае решения (14) могут быть достаточно просто получены численными методами. На рис. 2 приведена в качестве примера зависимость положения трех первых уровней от параметров квантовой ямы при отсутствии и наличии химического сдвига термов соответственно. В численных расчетах использовано значение параметра межзонного взаимодействия  $v = 4.5 \cdot 10^{-8}$  эВ·см, что соответствует РbTe. Нетрудно видеть, что с уменьшением глубины и ширины ямы двумерные состояния «выталкиваются» из квантовой ямы.

Представляет интерес записать явные выражения для решений (14) в некоторых предельных случаях, когда яма образована полупроводником с очень узкой запрещенной зоной. Прежде всего отметим, что помимо параметров, определяющих энергетическую структуру модели, в (14) входит дополнительный энергетический параметр  $v/L$ , связанный с шириной квантовой ямы.

Для структуры вида  $\Delta \ll \Delta_1 = \Delta_2$  (тип I) спектр двумерных состояний определяется выражением

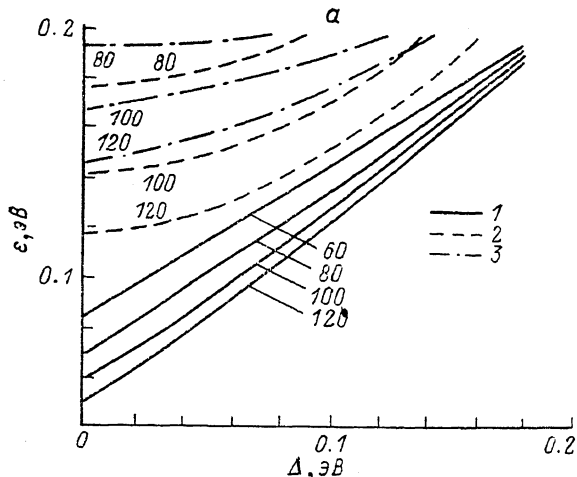
$$\epsilon(k) = \pm \left[ \Delta^2 + \frac{\pi^2 v^2}{L^2} \left( n + \frac{1}{2} \right)^2 + k^2 v^2 \right]^{1/2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (15)$$

для относительно широкой ямы, когда  $\Delta_1 \gg v/L \gg (\Delta \Delta_1)^{1/2}$ , и

$$\epsilon(k) = \pm \left[ \Delta_1^2 \left( 1 - \frac{\Delta_1^2 L^2}{v^2} \right) + k^2 v^2 \right]^{1/2} \quad (16)$$

при  $v/L \gg \Delta_1$ .

Для структуры  $\Delta_2=0$ ,  $\Delta \ll \Delta_1$  (тип II) спектр двумерных состояний определяется (15) при  $v/L \sim \Delta_1/2$  и выражением (16) с формальной заменой  $v \rightarrow 2v$



при  $v/L \gg \Delta_1$ .

В случае большой ширины ямы  $v/L \sim \Delta \ll \Delta_1$  в обеих рассмотренных структурах спектр двумерных состояний имеет вид

$$\varepsilon(k) = \pm \left[ \Delta^2 + \frac{\pi^2 v^2}{L^2} (n+1)^2 + k^2 v^2 \right]^{1/2}. \quad (17)$$

Отметим, что для структуры типа I предельный переход  $\Delta \rightarrow 0$  (бесщелевой полупроводник) возможен, естественно, только в (15).

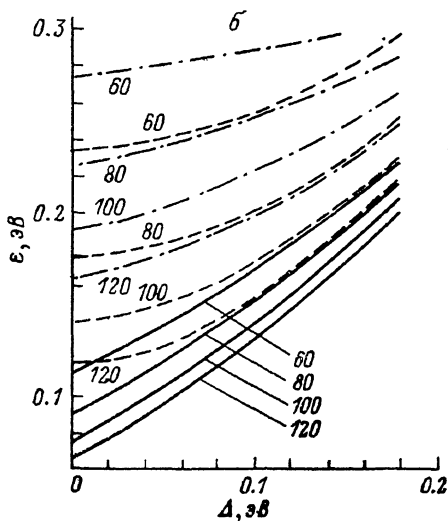


Рис. 2. Зависимость положения двумерных электронных состояний в квантовой яме от параметра  $\Delta$ .

$n$ : 1 — 0, 2 — 1, 3 — 2; а —  $\Delta_1 = \Delta_2 = 0.2$  эВ, б —  $\Delta_1 = 0.3$ ,  $\Delta_2 = 0.1$  эВ. Числа у кривых соответствуют ширине ямы (в Å).

Как следует из (15)—(17), положение двумерных электронных состояний в квантовой яме для полупроводника со спектром дираковского типа определяется помимо ее глубины также величиной межзонного взаимодействия и размерами ямы. Кроме того, эффективная масса для движения в плоскости ямы при большой ее глубине также определяется параметром  $v/L$ .

Авторы выражают благодарность Г. И. Бирюк за помощь на начальной стадии работы.

#### Л и т е р а т у р а

- [1] Силин А. П. // УФН. 1985. Т. 147. В. 3. С. 485—521.
- [2] Esaki L. // IEEE J. Quant. Electron. 1986. V. QE-22. N 9. P. 1611—1624.
- [3] Schulman J. N., McGill T. C. // Appl. Phys. Lett. 1979. V. 34. N 10. P. 663—667.
- [4] Smith D. L., McGill T. C., Schulman J. N. // Appl. Phys. Lett. 1983. V. 43. N 2. P. 180—182.
- [5] Силин А. П. // Кр. сообщ. по физике ФИ АН СССР. 1985. № 12. С. 13—16.
- [6] Kinoshita H., Fujiyasu H., Ishida A., Kuwabata H. // Lect. Not. Phys. 1982. V. 152. P. 368—372.
- [7] Fujiyasu H., Ishida A., Kuwabara H., Shinomura S., Takaoka S., Murase K. // Surf. Sci. 1984. V. 142. N 1-3. P. 579—585.
- [8] Ambrosch K. E., Clemens H., Fanter E. J., Bauer G., Kriechbaum M., Kocevar P., Nicolas R. J. // Surf. Sci. 1984. V. 142. N 1-3. P. 571—578.
- [9] Bastard G. // Phys. Rev. 1982. V. B24. N 10. P. 5693—5697.
- [10] Bastard G. // Phys. Rev. 1982. V. B25. N 12. P. 7584—7597.

- [11] White S., Sham L. J. // Phys. Rev. Lett. 1981. V. 47. N 12. P. 879—882.
- [12] Altarelli M. // Phys. Rev. 1983. V. B28. N 2. P. 842—845.
- [13] Shuurmans M. F. H., Hoof G. W. // Phys. Rev. 1985. V. B31. N 12. P. 8041—8049.
- [14] Bastard G. // Surf. Sci. 1986. V. 170. N 1-2. P. 426—437.
- [15] Волков Б. А., Панкратов О. А. // Письма ЖЭТФ. 1985. Т. 42. В. 4. С. 145—148.
- [16] Кусмарцев Ф. В., Цвелик А. М. // Письма ЖЭТФ. 1985. Т. 42. В. 5. С. 207—210.
- [17] Панкратов О. А. // Письма ЖЭТФ. 1987. Т. 45. В. 2. С. 82—85.
- [18] Pankratov O. A., Pakhomov S. V., Volkov B. A. // Sol. St. Commun. 1987. V. 61. N 1. P. 93—96.
- [19] Pankratov O. A. // Phys. Lett. 1987. V. A124. N 7. P. 360—366.
- [20] Fradkin E. O., Dagotto E., Boyanovsky D. // Phys. Rev. Lett. 1986. V. 57. N 23. P. 2967—2970.
- [21] Boyanovsky D., Dagotto E., Fradkin E. // Nucl. Phys. 1987. V. B285. N 2. P. 340—362.
- [22] Korenman V., Drew H. D. // Phys. Rev. 1987. V. B35. N 12. P. 6446—6449.
- [23] Хуанг К. Кварки, лептоны, калибровочные поля. М., 1985. 550 с.
- [24] Kim L. S., Drew H. D., Doezema R. E., Heremans J. P., Partin D. L. // Phys. Rev. 1987. V. B35. N 5. P. 2521—2523.

Львовский политехнический институт  
им. Ленинского комсомола

Получена 30.06.1988  
Принята к печати 27.10.1988