

МАССЫ ДЫРОЧНЫХ ПОДЗОН РАЗМЕРНОГО КВАНТОВАНИЯ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР РАЗНОЙ ОРИЕНТАЦИИ

Л. Г. Герчиков, А. В. Субашиев

Санкт-Петербургский государственный технический университет,
195251, Санкт-Петербург, Россия
(Получена 8.07.1992. Принята к печати 14.09.1992)

Получены аналитические выражения для эффективных масс дырочных подзон размерного квантования гетероструктур полупроводников с вырожденной валентной зоной с учетом гофрировки дырочного спектра в напряженных квантовых слоях разной ориентации. Рассмотрена зависимость дисперсии подзон от направления роста гетероструктуры, величины скачка края валентной зоны на гетерогранице, толщины пленки и ее деформации. Обсуждается влияние гофрировки и деформации на поведение масс подзон вблизи перехода полупроводник—полуметалл—полупроводник в гетероструктурах типа CdTe—HgTe.

Введение. Как показывают результаты качественного анализа [1] и численных расчетов (см., например, [2-4]), спектр размерного квантования дырок кубических полупроводников существенным образом зависит от направления роста гетероструктуры. Эта зависимость обусловлена в основном гофрировкой энергетического спектра тяжелых дырок. Кроме того, вследствие различия постоянных решетки полупроводниковых кристаллов, образующих гетероструктуру, возникает деформация слоев, величина которой и ее влияние на спектр носителей различны для разных ориентаций гетерограницы.

Ввиду сложности поведения дырочных подзон, связанной с взаимодействием состояний легких и тяжелых дырок [5, 6], а также с возможностью появления поверхностных состояний на отдельных гетерограницах [6, 7], анализ зависимости энергетического спектра от параметров материалов гетероструктуры и направления роста на основании данных численных расчетов оказывается затруднен.

В настоящей работе найдены аналитические выражения для масс дырочных подзон размерного квантования гетероструктур, выращенных по различным кристаллографическим направлениям, позволяющие проанализировать влияние анизотропии объемного спектра на спектр двумерных дырок. Результаты получены в модели бесконечно глубокой потенциальной ямы (БГЯ) при произвольном соотношении масс легких (m_l) и тяжелых (m_h) дырок, а также в модели ямы конечной глубины для малого отношения масс $\beta = m_l/m_h \ll 1$, когда мощность потенциальной ямы для тяжелых дырок велика $m_h \Lambda a^2 / \hbar^2 \pi^2 \gg 1$, где a — ширина, Λ — глубина потенциальной ямы.

Рассмотрено влияние анизотропии дырочного спектра на поведение масс подзон размерного квантования в гетероструктурах типа Cd_{1-x}Hg_xTe—HgTe вблизи перехода полупроводник—полуметалл—полупроводник [6], происходящего при изменении температуры или толщины пленки.

Для пленок, выращенных по направлениям $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$, рассмотрено изменение масс подзон при деформации пленок, а также зависимости масс подзон от толщины пленок в напряженных гетерослоях.

Ранее для массы дырочных состояний кубических полупроводников описываются гамильтонианом Латтинжера (см. [11])

Модель бесконечно глубокой потенциальной ямы

В приближении эффективной массы дырочные состояния кубических полупроводников описываются гамильтонианом Латтинжера (см. [11])

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left\{ (\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma_2) \hat{k}^2 - 2\gamma_2 \sum_i \hat{j}_i k_i^2 - 2\gamma_3 \sum_{i \neq l} \hat{j}_{il} k_i k_l \right\}, \quad (1)$$

где m_0 — масса свободного электрона, $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ — параметры Латтинжера, k_i — декартовы проекции волнового вектора дырок на кристаллографические оси четвертого порядка кубического кристалла, \hat{j}_j — матрицы момента $j = 3/2$.

В кристаллах без центра инверсии гамильтониан зоны Γ_8 , помимо квадратичных по k слагаемых, содержит и нечетные по k члены, приводящие к спиновому расщеплению дырочного спектра [11]. Далее эти эффекты считаются малыми.

Для нахождения масс подзон размерного квантования удобно использовать kp -метод [12], выбирая в качестве нулевого приближения состояния размерного квантования дырок с нулевым значением импульса движения вдоль пленки $q = 0$.

Сначала найдем массы подзон размерного квантования в модели БГЯ. В этом случае упрощающим обстоятельством является то, что в БГЯ при $q = 0$ квантование легких и тяжелых дырок происходит независимо. Действительно, при нормальном отражении от гетерограницы меняются знаки всех проекций волнового вектора k , что оставляет спиновые части собственных волновых функций гамильтониана (1) неизменными. Поэтому при $q = 0$ волновые функции состояний в яме, удовлетворяющие граничным условиям $\Psi = 0$ при $z' = 0, a$, где oz' — ось в направлении нормали к гетерогранице n , a — ширина ямы, имеют вид

$$\Psi_{\nu i N} = \chi_{\nu i} F_N(z'). \quad (2)$$

Здесь $F_N(z') = \sqrt{2/a} \sin(\pi N z'/a)$, $N = 1, 2, 3, \dots$, $\chi_{\nu i}$ — спинорные собственные волновые функции гамильтониана (1) при $k \parallel n$ ($q = 0$). Два значения индекса ν соответствуют легким ($\nu = l$) и тяжелым ($\nu = h$) дыркам, индекс $i = 1, 2$ нумерует два вырожденных по спину состояния дырки данного сорта ν . В симметричной потенциальной яме сохраняется двукратное спиновое вырождение спектра, что позволяет выделить две не взаимодействующие группы состояний с определенными значениями зеркальной четности [13, 14] и рассматривать их независимо. Соответственно индекс i ниже опущен.

Как следует из (2), в модели БГЯ положения центров подзон размерного квантования при $q = 0$ определяются формулой

$$\epsilon_{\nu N} = -\frac{\hbar^2 \pi^2 N^2}{2m_0 a^2} \mu_{\nu}(n), \quad N = 1, 2, 3, \dots \quad (3)$$

где $\mu_{\nu}(n)$ — безразмерная обратная эффективная масса дырок сорта ν в направлении n ,

$$\mu_{\nu}(n) = \gamma_1 \pm 2 \sqrt{\gamma_2^2 + 3(\gamma_3^2 - \gamma_2^2)(n_x^2 n_y^2 + n_x^2 n_z^2 + n_y^2 n_z^2)}. \quad (4)$$

Здесь и далее верхний знак (+) соответствует легким ($\nu = 1$), а нижний (—) тяжелым ($\nu = \hbar$) дыркам.

Оператор возмущения $\delta \hat{H} = \hat{H} - \hat{H} (q = 0)$ удобно записывать в виде

$$\delta \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0} \left[\hat{A}q^2 + \hat{B}q \left(-i \frac{\partial}{\partial z'} \right) \right], \quad (5)$$

где \hat{A} и \hat{B} — матрицы, зависящие от направлений p и q , явный вид которых следует из (1).

С учетом (2), (3), (5) обратная эффективная масса подзоны νN определяется выражением

$$\mu_{\nu N} = \langle \chi_{\nu} | \hat{A} | \chi_{\nu} \rangle - \frac{\hbar^2}{2m_0} \sum_{N'} |\langle \chi_{\nu} | \hat{B} | \chi_{\nu'} \rangle|^2 \frac{|\langle F_{\nu N} | \frac{\partial}{\partial z'} | F_{\nu' N'} \rangle|^2}{\varepsilon_{\nu N} - \varepsilon_{\nu' N'}}. \quad (6)$$

В случае БГЯ суммирование в (6) происходит по всем состояниям размерного квантования $N = 1, 2, 3, \dots$ дырок сорта $\nu' \neq \nu$. Входящую в (6) сумму нетрудно вычислить, выражая поправку второго порядка через координатную часть функции Грина уравнения Шредингера нулевого по $\delta \hat{H}$ приближения

$$G_{\nu}(\varepsilon, z'_1, z'_2) = \sum_N F_{\nu N}(z'_1) F_{\nu N}(z'_2) / (\varepsilon - \varepsilon_{\nu N}).$$

Функция Грина в БГЯ имеет вид

$$G_{\nu}(\varepsilon, z'_1, z'_2) = \frac{2m_0}{\hbar^2 \mu_{\nu}(n) k_{\nu} \sin k_{\nu} a} \begin{cases} \sin k_{\nu} z'_1 \sin k_{\nu} (z'_2 - a), & z'_1 \leq z'_2, \\ \sin k_{\nu} z'_2 \sin k_{\nu} (z'_1 - a), & z'_1 > z'_2, \end{cases} \quad (7)$$

где

$$k_{\nu} = k_{\nu}(\varepsilon) = \sqrt{2m_0 |\varepsilon| / \hbar^2 \mu_{\nu}(n)}.$$

Формулы (5)–(7) позволяют найти обратные массы подзон размерного квантования в модели БГЯ при произвольных направлениях p и $\tau = q/q$. Полученные таким образом выражения можно записать в виде

$$\mu_{\nu N p}(\mathbf{n}, \boldsymbol{\tau}) = \mu_{\nu}(\mathbf{n}) [1 + C(\mathbf{n}, \boldsymbol{\tau}) \Phi_p(\delta_{\nu N})] + \Delta \mu_{\nu}(\mathbf{n}, \boldsymbol{\tau}), \quad (8)$$

где p — четность уровня N , $p = (-1)^{N+1}$, $\delta_{\nu N} = \pi N \beta^{\tau+1/2}$, $\beta = \beta(\mathbf{n}) = \mu_n(\mathbf{n}) / \mu_l(\mathbf{n})$,

$$\Phi_p(\delta_{\nu N}) = \frac{p + \cos \delta_{\nu N}}{\delta_{\nu N} \sin \delta_{\nu N}} = \frac{p}{\delta_{\nu N}} \left[\operatorname{ctg} \frac{\delta_{\nu N}}{2} \right]^p. \quad (9)$$

Величины $C(\mathbf{n}, \boldsymbol{\tau})$ и $\Delta \mu_{\nu}(\mathbf{n}, \boldsymbol{\tau})$ в случае $\mathbf{n} \parallel \langle 111 \rangle$ равны

$$C = \frac{2\gamma_2^2 + \gamma_3^2}{\gamma_3^2}, \quad \Delta \mu_{\nu} = \mp 2 \frac{\gamma_3^2 - \gamma_2^2}{\gamma_3}. \quad (10)$$

При ориентации пленки с вектором \mathbf{n} , лежащим в плоскости (001) и составляющим угол α с направлением [100], обратные массы подзон (8) зависят от α и $\boldsymbol{\tau}$, причем для $\boldsymbol{\tau} \parallel [001]$

$$C(\alpha) = \frac{12\gamma_3^2}{4\gamma_2^2 + 3(\gamma_3^2 - \gamma_2^2) \sin^2 2\alpha},$$

$$\Delta\mu_\nu(\alpha) = \pm \frac{3(\gamma_3^2 - \gamma_2^2)(2 - \sin^2 2\alpha)}{\sqrt{4\gamma_2^2 + 3(\gamma_3^2 - \gamma_2^2) \sin^2 2\alpha}}, \quad (11)$$

а для τ в плоскости (001)

$$C(\alpha) = \frac{3\gamma_2^2 \{(\gamma_3^2 - \gamma_2^2)^2 \sin^2 4\alpha + 4\gamma_3^2 [4\gamma_2^2 + 3(\gamma_3^2 - \gamma_2^2) \sin^2 2\alpha]\}}{[4\gamma_2^2 + 3(\gamma_3^2 - \gamma_2^2) \sin^2 2\alpha]^2 [\gamma_2^2 + (\gamma_3^2 - \gamma_2^2) \sin^2 2\alpha]},$$

$$\Delta\mu_\nu(\alpha) = \pm \frac{3(\gamma_3^2 - \gamma_2^2) \{ \gamma_2^2 (\gamma_3^2 - \gamma_2^2) \sin^2 4\alpha + 4 [4\gamma_2^2 + 3(\gamma_3^2 - \gamma_2^2) \sin^2 2\alpha] [\gamma_2^2 \cos^4 2\alpha - \gamma_3^2 \sin^4 2\alpha] \}}{2(4\gamma_2^2 + 3(\gamma_3^2 - \gamma_2^2) \sin^2 2\alpha)^{3/2} [\gamma_2^2 + (\gamma_3^2 - \gamma_2^2) \sin^2 2\alpha]} \quad (12)$$

В частном случае $\alpha = 0, \pi/2$ (т. е. при $n \parallel (100)$)

$$C = \frac{3\gamma_3^2}{\gamma_2^2}, \quad \Delta\mu_\nu = \pm 3 \frac{\gamma_3^2 - \gamma_2^2}{\gamma_2}, \quad (13)$$

что совпадает с результатом, полученным ранее [8, 9] другим методом.

Результаты численного расчета масс нижних подзон по формулам (8)—(13) для пленки с параметрами Латтинжера, соответствующими $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}$ при различных ориентациях n и τ , приведены в табл. 1. Как следует из (8)—(13) и данных табл. 1, в целом зависимость $\mu_{\nu N p}$ (n, τ) от ориентации пленки¹ более существенна для подзон тяжелых дырок, что отражает более сильную гофрировку спектра тяжелых дырок в объемном материале. Однако при $\beta(n) \ll 1$ первая подзона тяжелых дырок $h1$ (для которой $\delta_{h1} < 1$ и $p = +1$) имеет легкую массу [5, 6] и поэтому малую анизотропию. Сильное увеличение дисперсии первой подзоны тяжелых дырок обусловлено ее взаимодействием с нечетными состояниями легких дырок и возникающим вследствие этого изменением нормальной компоненты импульса с ростом q . Взаимодействие между состояниями описывается в формуле (8) слагаемым, пропорциональным $\Phi_p(\delta_{\nu N})$. Вклад этого слагаемого в дисперсию подзон определяется взаимным расположением центров подзон (3), (4) и потому сильно зависит от ориентации пленки. В частности, значениям $\delta_{\nu N}(n) \rightarrow \pi K$, K — целое число, соответствует близкое расположение пары уровней и $\nu N, \nu' K$. Если при этом волновые функции двух уровней обладают разной четностью при $q = 0$, $(-1)^N = (-1)^{K+1}$, то вследствие сильного расталкивания между этими состояниями дисперсия подзон νN и $\nu' K$ оказывается аномально большой, а массы аномально малы, причем $\mu_{\nu' N, p}^{-1}(n, \tau) \approx -\mu_{\nu^{-1}, K-p}^{-1}(n, \tau) \ll m_j$. Как видно из табл. 1, в пленке $\langle 100 \rangle \text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}$ близкими оказываются уровни $h2$ и $l1$.

Таблица 1

Массы подзон размерного квантования $m_{\nu N}/m_0$ при различных ориентациях n пленки $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}$ ($\gamma_1 = 8.2, \gamma_2 = 2.7, \gamma_3 = 3.5$) в модели БГЯ (без деформации)

νN \ n	[100]	[111]	[110]	
			$\tau \parallel [1\bar{1}0]$	$\tau \parallel [001]$
$h1$	0.114	0.098	0.087	0.118
$h2$	-0.029	0.442	0.276	-0.212
$h3$	-0.210	0.234	0.164	-1.633
$h\infty$	-0.365	0.245	0.166	-1.400
$l1$	0.022	0.123	0.102	0.062
$l2$	0.066	0.062	0.102	0.062
$l3$	0.047	0.079	0.102	0.062
$l\infty$	0.052	0.081	0.096	0.058

¹ Ниже зависимость масс подзон от ориентации пленки мы будем называть «анизотропией» масс.

Таблица 2

Массы электронных и дырочных подзон размерного квантования $m_{\nu N}/m_0$ при различной ориентации n пленки HgTe ($\gamma_1 = 14.8$, $\gamma_2 = 9.0$, $\gamma_3 = 8.2$) в модели БГЯ (без деформации)

νN	n	[100]	[111]	[110]	
				$\tau \parallel [1\bar{1}0]$	$\tau \parallel [001]$
$h2$		-0.225	0.382	0.247	-0.353
$h3$		-0.228	0.583	0.292	-0.298
$h4$		-0.299	0.308	0.203	-0.475
$h\infty$		-0.721	0.202	0.144	-2.269
$h1$		0.052	0.057	0.062	0.051
$l1$		0.050	0.037	0.036	0.046
$l2$		0.041	0.033	0.031	0.037
$l3$		0.039	0.031	0.030	0.037
$l\infty$		0.035	0.029	0.027	0.034

Примечание. Знаки масс подзоны $h1$, а также остальных электронных подзон $l1-l\infty$ изменены в соответствии с тем, что их дисперсия положительна.

отрицательной. Согласно табл. 1, взаимодействие между подзонами оказывается достаточно слабым, а обратная масса подзон близка к (14) уже при $N > 3$.

Формулы (8)—(13) описывают также дисперсию подзон в пленке бесщелевого полупроводника, например HgTe, когда $\mu_l(n) \times \mu_h(n) < 0$. Результаты численного расчета масс подзон по формулам (8)—(13) для пленки HgTe приведены в табл. 2. В этом случае входящие в (9) фазы $\delta_{\nu N}$ являются чисто мнимыми. Кроме того, в силу малого отношения масс $|\delta_{h1}| = \pi|\beta|^{1/2} \approx 0.7 < 1$, поэтому подзона $h1$ (в случае достаточно толстой пленки, когда $m_l \Lambda a^2 / \hbar^2 \pi^2 \gg 1$, и применима модель БГЯ) имеет малую отрицательную массу и является электронной (см. [5, 6, 15]). Массы последующих дырочных подзон с $N > 2$ ввиду уменьшения $\Phi_p(\delta_{hN})$ с ростом N монотонно приближаются к величине $\mu_{h\infty}(n, \tau)$, соответствующей (14). В результате массы всех дырочных подзон для пленки (100) оказываются отрицательными, а для пленки (111) положительными. Ширина запрещенной зоны в толстой пленке HgTe определяется расстоянием между подзонами $h1$ и $h2$. Поэтому пленка с $n \parallel \langle 111 \rangle$ является прямозонным полупроводником, тогда как пленка с $n \parallel \langle 100 \rangle$ (или с n в плоскости (001) $m_{h2} < 0$ и пленка является непрямым полупроводниковым материалом. Такое различие в спектрах подзон должно проявляться в зависимости электронных свойств толстых пленок HgTe от ориентации n .

Отметим также, что поскольку $\Phi_p(\delta_{\nu N}) < 0$, массы электронных подзон оказываются больше, чем массы объемного спектра.

Массы подзон размерного квантования с учетом туннелирования легких дырок

При описании методом плавных огибающих электронных состояний в реальных гетероструктурах, которым соответствуют потенциальные ямы конечной глубины, существенно, что при произвольной ориентации гетерограницы спинорные части волновых функций данного сорта в яме и в барьере различны даже при $q \neq 0$. Это приводит к взаимным превращениям дырок и при нормальном отражении от гетерограницы, что затрудняет нахождение волновых функций при $q = 0$ и применение $k\text{-}$ метода для определения масс подзон. Поэтому далее мы ограничимся рассмотрением гетероструктур с $n \parallel \langle 100 \rangle$ и $n \parallel \langle 111 \rangle$. В таких структурах квантование состояний легких и тяжелых дырок при $q = 0$ происходит

С ростом номера уровня ν взаимодействие между подзонами уменьшается, $\Phi_p(\delta_{\nu N}) \propto 1/N$, так что при $N \gg 1$

$$\begin{aligned} \mu_{\nu N p}(n, \tau) |_{N \gg 1} &= \\ &= \mu_{\nu}(n) + \Delta\mu_{\nu}(n, \tau). \end{aligned} \quad (14)$$

Выражение (14) совпадает с обратной эффективной массой свободной дырки сорта ν , движущейся вдоль пленки в направлении τ при фиксированном (условием квантования) значении проекции импульса на направление нормали n . Для тяжелых дырок этот вклад в дисперсии подзон существенно анизотропен, в частности, для ряда ориентаций n и направлений τ (например, при n в плоскости (001), а $\tau \parallel [001]$) масса подзон с большим номером N оказывается

независимо и при произвольной глубине потенциальной ямы, поскольку при этом выбор в качестве оси квантования направления p диагонализует матричный гамльтониан (1) как в яме, так и в барьере.

Положение центров подзон $\varepsilon_{\nu N}$ в этом случае определяется из решения трансцендентных уравнений

$$Z_{\nu p}(\varepsilon, n) = \frac{\mu_{\nu_1}(n) k_\nu}{\mu_{\nu_2}(n) \kappa_\nu} - p \operatorname{ctg}^p \frac{k_\nu a}{2} = 0, \quad (15)$$

где $k_\nu = \sqrt{2m_0 |\varepsilon| / \hbar^2 \mu_{\nu_1}(n)}$ — волновой вектор дырок сорта ν в яме, $\kappa_\nu = \sqrt{2m_0 (\varepsilon + \Lambda) / \hbar^2 \mu_{\nu_2}(n)}$ — модуль волнового вектора в барьере, $\mu_{\nu_1}(n)$, $\mu_{\nu_2}(n)$ — обратные массы в яме и в барьере, энергия ε отсчитывается от края валентной зоны в материале ямы.

При определении дисперсии минизон kp -методом следует учитывать, что матрицы \hat{A} и \hat{B} из (5) различны в яме и в барьере, поэтому спинорные и координатные части матричных элементов в (5) не факторизуются. Ввиду громоздкости возникающих выражений остановимся на случае, когда мощность потенциальной ямы для тяжелых дырок велика $m_b \Lambda a^2 / \pi^2 \hbar^2 \gg 1$ и длина туннелирования тяжелых дырок под барьер много меньше ширины ямы

$$\hbar / \sqrt{m_b (\varepsilon_{bN} + \Lambda)} \ll a.$$

При этом длина туннелирования легких дырок в силу малого отношения масс $\beta(n) \ll 1$ может быть сравнимой с шириной ямы, что необходимо учитывать при нахождении масс подзон. Поэтому при применении kp -метода в этом случае следует использовать волновые функции Грина частиц в потенциальной яме конечной глубины. Используя (5) для нахождения квадратичных по k поправок к спектру дырок, получим, что в области $|\varepsilon| < \Lambda$ массы подзон тяжелых дырок по-прежнему определяются формулой (8), в которой вместо $\Phi_p(\delta_{\nu N})$ следует использовать величину

$$\Phi_p^* = \frac{\Lambda^2}{(\varepsilon_{bN} + \Lambda)(\varepsilon_{bN} (1 - \mu_{\nu_1}^*(n) / \mu_{\nu_2}^*(n)) + \Lambda)} \frac{1}{k_l a Z_{l, -p}(\varepsilon_{bN}, n)}, \quad (16)$$

где величины k_l и $Z_{l, -p}$ должны быть вычислены при энергии $\varepsilon = \varepsilon_{bN}$.

Как следует из (16), учет туннелирования легких дырок наиболее существенно изменяет массу первой подзоны тяжелых дырок, поскольку для этой подзоны величина $Z_{l, -p}(\varepsilon_{bN}, n)$ мала, и поправка к ней, связанная с туннелированием легких дырок при $m_l \Lambda a^2 / \hbar^2 \leq 1$ ($\kappa_l a \leq 1$) становится большой. Увеличение волновой функции легких дырок в подбарьерной области при уменьшении ширины ямы $a \leq \hbar / \sqrt{m_l \Lambda}$ ослабляет их вклад в дисперсию подзоны $h1$. В результате масса m_{h1} монотонно возрастает до значений порядка $\sqrt{m_l m_b}$ при $a \sim \hbar / \sqrt{m_b \Lambda}$. В связи с этим в узкой яме увеличивается анизотропия массы первой подзоны тяжелых дырок.

Для качественного описания поведения m_{h1} при дальнейшем уменьшении ширины потенциальной ямы, когда формула (16) уже неприменима, можно использовать соответствующие формулы изотропной модели [16]. Такие оценки показывают, что и в случае, когда яма становится мелкой и для тяжелых дырок $m_b \Lambda a^2 / \hbar^2 \leq 1$, масса подзоны m_{h1} остается порядка $\sqrt{m_l m_b}$.

Изменение масс последующих подзон тяжелых дырок m_{bN} , $N > 2$ при учете конечной глубины потенциальной ямы связано в основном с изменением взаимно-

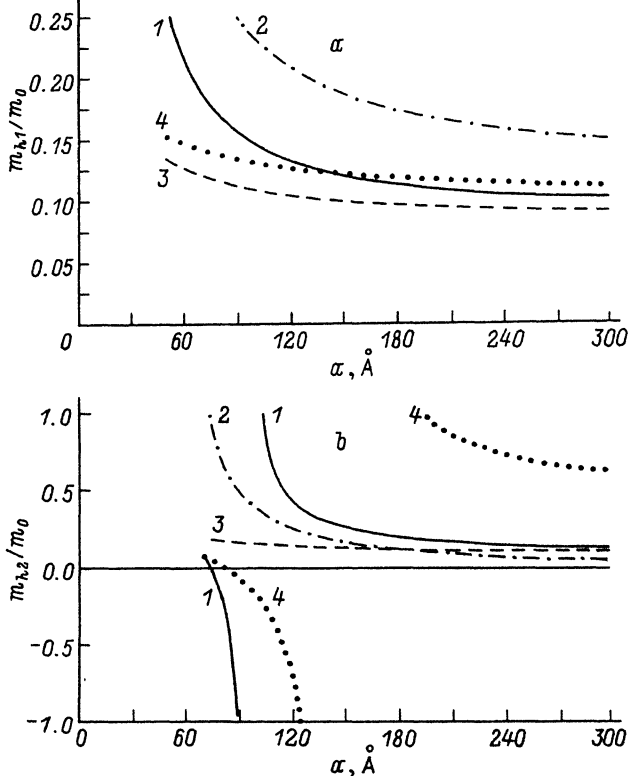


Рис. 1. Зависимость эффективных масс подзон размерного квантования тяжелых дырок $h1$ (a) и $h2$ (b) от толщины a слоя $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}$ в гетероструктуре $\text{GaAs}-\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}$. Приведены массы для пленки с ориентацией $n \parallel \langle 100 \rangle$ с учетом (1) и в отсутствии (2) деформации, а также для пленки с $n \parallel \langle 111 \rangle$ с учетом (3) и в отсутствии (4) деформации.

го расположения уровней легких и тяжелых дырок в зависимости от ширины ямы.

При вычислении масс подзон легких дырок в яме, глубокой для тяжелых дырок, следует учесть, что при β (n) $\ll 1$ (т. е. когда в силу малого отношения масс m_l/m_h формулы (8)–(13) модели БГЯ уже неприменимы) гофрировка объемного спектра легких дырок мала, и анизотропия масс подзон легких дырок связана в основном с изменением в зависимости от ориентации пленки расположения центров подзон размерного квантования при $q = 0$. Поэтому с точностью до малых поправок по β выражение для масс подзон легких дырок может быть получено из соответствующих формул изотропной модели [16] заменой $\mu_{\nu 1}, \mu_{\nu 2} \rightarrow \mu_{\nu 1}(n), \mu_{\nu 2}(n)$

$$\mu_{lNp} = - \left[\frac{\mu_{l1}(n)}{\varepsilon_{lN}} \left(1 - p \frac{k_j a}{\sin k_j a} \right) - \frac{\mu_{l2}(n)}{\varepsilon_{lN} + \Lambda} - \frac{m_0 \Lambda^2}{\hbar^2 k_j \alpha \varepsilon_{lN} (\varepsilon_{lN} + \Lambda)} \right] \times \left(\frac{1}{Z_{l,-p}(\varepsilon_{lN}, n)} + \frac{3\beta^{1/2}(n)}{Z_{h,-p}(\varepsilon_{lN}, n)} \right) / \left[\frac{1}{\varepsilon_{lN}} \left(1 + p \frac{k_j a}{\sin k_j a} \right) - \frac{1}{\varepsilon_{lN} + \Lambda} \right], \quad (17)$$

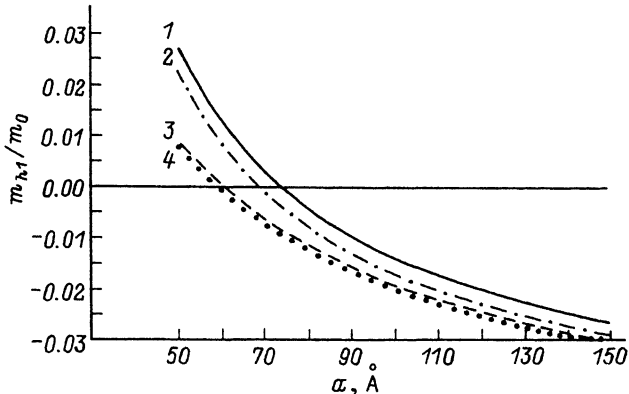


Рис. 2. Зависимость эффективной массы первой подзоны размерного квантования тяжелых дырок $h1$ от толщины a слоя HgTe в гетероструктуре CdTe—HgTe. Приведены массы для пленки с ориентацией $n \parallel \langle 100 \rangle$ с учетом (1) и в отсутствии (2) деформации, а также для пленки с $n \parallel \langle 111 \rangle$ с учетом (3) и в отсутствии (4) деформации. Перемена знака m_{h1} при увеличении a соответствует превращению подзоны $h1$ из верхней дырочной в нижнюю электронную.

причем входящие в (17) величины k_l , k_b , κ_l , κ_b должны быть вычислены при энергии $\varepsilon = \varepsilon_{lN}$.

Зависимость масс первой и второй подзон тяжелых дырок $h1$ и $h2$ от толщины пленки $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}$ в гетероструктуре GaAs— $\text{In}_{0.1}\text{Ga}_{0.9}\text{As}$ для ориентаций пленки $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$, рассчитанная по формулам (8), (11), (13), (16), показана на рис. 1, а, б. Сравнение с данными табл. 1 показывает, что поправки к массе уровня $h1$, связанные с туннелированием легких носителей, существенны уже при $a \leq 200 \text{ \AA}$, когда в яме существует не более двух уровней легкой дырки. Влияние туннелирования оказывается более сильным для пленки $\langle 100 \rangle$, поскольку в этом случае величина $\mu_{h\infty}(\langle 100 \rangle)$ из (14) отрицательна и происходит компенсация вкладов слагаемого, связанного с взаимодействием с легкими дырками, и слагаемого $\Delta\mu_b$ в (8). Малая масса подзоны $h2$ для ориентаций $\langle 100 \rangle$ при больших a связана с близким расположением подзоны легких дырок $l1$ (причем $\varepsilon_{l1} > \varepsilon_{h2}$ при $a < 600 \text{ \AA}$). При уменьшении a расстояние между подзонами растет, что ведет к увеличению m_{h2} .

Для гетероструктур типа $\text{Cd}_{1-x}\text{Hg}_x\text{Te}$ —HgTe, содержащих слой бесщелевого полупроводника, отношение $m_{l2}/m_{l1} < 0$ и величина $Z_{l, -1}(\varepsilon_{hN}, n)$ в (16) при некоторых значениях $a = a_N$ обращается в нуль. Значениям $a = a_N$ соответствует совпадение положений уровня hN и $S1$, связанного с пограничными состояниями легких дырок на отдельных гетерограницах [6]. Согласно выражения (8), (16) и (17), из равенства нулю величин $Z_{l, -1}(\varepsilon_{hN}, n)$ и $Z_{b, +1}(\varepsilon_{S1}, n)$ следует, что в точке $a = a_N$ одновременно обращаются в нуль эффективные массы подзон hN и $S1$, а квадратичный закон дисперсии подзон сменяется линейным. Таким образом, вблизи a_N массы подзон hN и $S1$ меняют знак, проходя через нуль, причем $m_{hN} = -m_{S1}$. Подобное поведение эффективных масс объясняется сильным расталкиванием между состояниями легких и тяжелых дырок разной четности, $S1, p = -1$ и $hN, p = +1$. Влияние гофрировки проявляется в зависимости положений точек пересечения и величины взаимодействия между состояниями легких и тяжелых дырок от ориентации гетероструктуры.

Результаты расчета массы подзоны $h1$ для ориентаций $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$ квантовой ямы HgTe в гетероструктуре CdTe—HgTe приведены на рис. 2. В соответствии с тем, что в HgTe $\mu_b(\langle 100 \rangle) > \mu_b(\langle 111 \rangle)$ перемена знака подзоны $h1$ и превращение

ее в электронную в пленке $\langle 111 \rangle$ должно происходить в меньших толщинах, чем в пленке $\langle 100 \rangle$. Ввиду сильного смещения центра легкой подзоны $S1$ при изменении a отличие массы подзоны $h1$ от результата в модели БГЯ оказывается большим при всех a , вплоть до $a \approx 300 \text{ \AA}$.

Изменение масс подзон при деформации пленки

Воздействие деформации на спектр дырок (в случае, когда расщепление спектра, создаваемое деформацией, много меньше спин-орбитального расщепления) описывается оператором $\hat{H}(\epsilon_{ij})$, имеющим вид, подобный (1) [11]

$$\hat{H}(\epsilon_{ij}) = (a_v + \frac{5}{4}b) \text{Sp}(\epsilon_{ij}) \hat{I} - b \sum_i \hat{J}_i^2 \epsilon_{ii} - \frac{1}{\sqrt{3}} d \sum_{i \neq m} [\hat{j}_i \hat{j}_m] \epsilon_{im}, \quad (18)$$

где a_v , b , d — константы деформационного потенциала валентной зоны, ϵ_{ij} — компоненты тензора деформации в кристаллических осях.

В модели БГЯ квантование состояний легких и тяжелых дырок при $q=0$ происходит независимо и в деформированной пленке. Поэтому волновые функции частиц имеют по-прежнему вид (2), а положение центров подзон деформированной пленки при $q=0$ определяется энергетическим спектром массивного деформированного кристалла $E_v(\mathbf{k}, \epsilon_{ij})$ [11]:

$$\epsilon_{vN} = E_v(\mathbf{k}_N, \epsilon_{ij}),$$

$$\mathbf{k}_N = (\pi N/a) \mathbf{n}, \quad N = 1, 2, 3, \dots \quad (19)$$

Согласно (19), деформация приводит к сдвигу уровней размерного квантования на величину, равную смещению края подзоны дырок соответствующего сорта в объемном материале.

При ориентации пленки, отличной от $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$, ее деформация оказывается анизотропной в плоскости пленки даже при ее сжатии (растяжении) по оси n , а возникающие изменения спектра подзон зависят от соотношения между модулями упругости материала пленки. По этой причине далее мы ограничимся рассмотрением пленок, выращенных по направлениям $\langle 100 \rangle$ и $\langle 111 \rangle$, изотропно деформированных в плоскости пленки.

Сдвиг уровней размерного квантования для пленки с $n \parallel \langle 100 \rangle$ равен

$$\delta \epsilon_{vN} = a_v \text{Sp}(\epsilon_{ij}) \mp b u_{100},$$

а для пленки с $n \parallel \langle 111 \rangle$

$$\delta \epsilon_{vN} = a_v \text{Sp}(\epsilon_{ij}) \mp \frac{d}{\sqrt{3}} u_{111}.$$

Здесь знак (+) соответствует легким, а (—) — тяжелым дыркам, $u_n = \epsilon_{x'x'} - \epsilon_{y'y'}$, $oz' \parallel n$.

Применение кр-метода для вычисления эффективных масс подзон в модели БГЯ вновь приводит к формулам типа (8), а именно:

$$\mu_{vN}(\mathbf{n}, u_n) = \mu_v(\mathbf{n}) [1 + \tilde{C}_{vN}(\mathbf{n}, u_n) \Phi_p(\delta_{vN})] + \Delta \tilde{\mu}_{vN}(\mathbf{n}, u_n), \quad (20)$$

причем входящие в (20) параметры зависят от расщепления валентной зоны. Для пленки с $n \parallel \langle 100 \rangle$

$$\mu_v = \gamma_1 \pm 2\gamma_2,$$

$$\delta_{vN} = \pi N \sqrt{\frac{\gamma_1 \pm 2 \left(\gamma_2 \mp \frac{\bar{b}u_{100}}{N^2} \right)}{\gamma_1 \mp 2\gamma_2}},$$

$$\tilde{C}_{vN} = \frac{3\gamma_3^2 \left[\gamma_1 \pm 2 \left(\gamma_2 \mp \frac{\bar{b}u_{100}}{N^2} \right) \right]}{\left(\gamma_2 \mp \frac{\bar{b}u_{100}}{2N^2} \right)^2 (\gamma_1 \mp 2\gamma_2)},$$

$$\Delta\tilde{\mu}_{vN} = \pm 3 \frac{\gamma_3^2 - \gamma_2^2 + \frac{\bar{b}u_{100}\gamma_2}{2N^2}}{\gamma_2 - \frac{\bar{b}u_{100}}{2N^2}},$$

$$\bar{b} = \frac{b2m_0a^2}{\pi^2\hbar^2}, \quad (21)$$

а для пленки с $n \parallel \langle 111 \rangle$

$$\mu_v = \gamma_1 \pm 2\gamma_3,$$

$$\delta_{vN} = \pi N \sqrt{\frac{\gamma_1 \pm 2 \left(\gamma_3 + \frac{\bar{d}u_{111}}{N^2} \right)}{\gamma_1 \mp 2\gamma_3}},$$

$$\tilde{C}_{vN} = \frac{(\gamma_3^2 + 2\gamma_2^2) \left[\gamma_1 \pm 2 \left(\gamma_3 + \frac{\bar{d}u_{111}}{N^2} \right) \right]}{\left(\gamma_3 + \frac{\bar{d}u_{111}}{2N^2} \right)^2 (\gamma_1 + 2\gamma_3)},$$

$$\Delta\tilde{\mu}_{vN} = \mp \frac{2(\gamma_3^2 - \gamma_2^2) + \frac{3\bar{d}u_{111}\gamma_3}{2N^2}}{\gamma_3 + \frac{\bar{d}u_{111}}{2N^2}},$$

$$\bar{d} = \frac{d2m_0a^2}{\sqrt{3}\pi^2\hbar^2}. \quad (22)$$

Согласно формулам (21), (22), влияние деформации на дисперсию подзон размерного квантования зависит от соотношения между величиной расщепления валентной зоны и энергией размерного квантования легких и тяжелых дырок. При расщеплении порядка энергии размерного квантования тяжелых дырок $\gamma_1 - 2\gamma_2 \sim \bar{b}u_{100}$ ($\gamma_1 - 2\gamma_3 \sim \bar{d}u_{111}$) массы подзон, имеющих сильную дисперсию ($m \sim m_l$), изменяются слабо, тогда как массы подзон с малой дисперсией ($m \sim m_h$) изменяются существенно $\delta_m \sim m_h$.

Деформационное изменение масс подзон быстро убывает с ростом номера подзоны (т. е. энергии соответствующего состояния). Однако оно может оказаться сильным при близком расположении пары уровней разной четности, когда их относительное деформационное смещение велико и значительно изменяет взаимное расталкивание состояний, определяющее массы близких подзон.

При деформированном расщеплении, сравнимом с энергией квантования легких дырок $\gamma_1 + 2\gamma_2 \sim \tilde{b}u_{100}$ ($\gamma_1 + 2\gamma_3 \sim \tilde{d}u_{111}$), сильное влияние деформации на дисперсию подзон приводит к тому, что масса всех подзон становится в общем случае порядка m_j .

В отличие от недеформированной пленки, относительное положение уровней размерного квантования легких и тяжелых дырок, вследствие расщепления дна валентной зоны, зависит от толщины пленки a . Соответственно зависящими от a (вследствие расталкивания состояний) оказываются и массы подзон размерного квантования, причем из-за пересечения подзон эта зависимость становится немонотонной. В частности, когда в результате деформации верхней из расщепившихся подзон оказывается подзона $h1$, ее масса в результате взаимодействия с подзонами тяжелых дырок оказывается в некотором узком интервале шириной (деформаций) отрицательной, что существенно увеличивает приведенную межзонную плотность состояний [17]. Вблизи пересечения подзон $h1$ и $h1$ обратная эффективная масса подзоны $h1$ оказывается равной $\mu_{h1} = \gamma_1 - \gamma_2 - 6\gamma_3^2 / (\gamma_1 - 2\gamma_2) < 0$ для $n \langle 100 \rangle$ и $\mu_{h1} = \gamma_1 - \gamma_3 - 2(\gamma_3^2 + 2\gamma_2) / (\gamma_1 - 2\gamma_3) < 0$ для $n \parallel \langle 111 \rangle$.

В достаточно широкой пленке, когда $\tilde{b}u_{100} \gg \gamma_2$ (или $\tilde{d}u_{111} \gg \gamma_3$), взаимодействие между подзонами становится слабым и дисперсия верхних из расщепившихся подзон определяется спектром носителей в объемном материале $\mu_{vN} = \mu_v(n) + \Delta\mu_{vN}(n)$. Это дает $\mu_{vN}(\langle 100 \rangle) = \gamma_1 \mp \gamma_2$, $\mu_{vN}(\langle 111 \rangle) = \gamma_1 \mp \gamma_3$, где знак (—) соответствует легким, а (+) тяжелым дыркам. Дисперсия нижней группы подзон испытывает немонотонные изменения с ростом a вследствие пересечений с подзонами дырок другого сорта.

Для первых уровней квантования тяжелых дырок формулы (20)—(22) непосредственно обобщаются на случай ямы конечной глубины, когда ее мощность для тяжелых дырок велика $m_b \Lambda a^2 / \pi^2 \hbar^2 \gg 1$ и энергия квантования $|\epsilon_{hN}| \ll \Lambda$. Для этого достаточно в формуле (20) в качестве Φ_p использовать выражение (16), при вычислении которого величины k_j и κ_j следует определять по законам дисперсии легких дырок в материалах ямы и барьера при энергии $\epsilon = \epsilon_{hN}$ (19) с учетом деформационного расщепления.

Формулы (20)—(22) позволяют определить массы подзон размерного квантования в напряженных квантовых слоях, деформация которых обусловлена различием постоянных решетки слоев гетероструктуры. Величина деформации в напряженной пленке на толстой подложке может быть найдена из условия равенства нулю нормальной компоненты тензора напряжений и оказывается равной [18] для $n \parallel \langle 100 \rangle$

$$u_{100} = \frac{C_{11} + 2C_{12}}{C_{11}} \frac{a - a_0}{a}, \quad (23)$$

для $n \parallel \langle 111 \rangle$

$$u_{111} = 3 \frac{C_{11} + 2C_{12}}{C_{11} + 2C_{11} + 4C_{44}} \frac{a - a_0}{a},$$

где a — равновесное значение постоянной решетки материала пленки, a_0 — постоянная решетки материала подложки (барьера), C_{11} , C_{12} , C_{44} — модули упругости пленки.

Результаты расчетов масс первой и второй подзоны размерного квантования $h1$ и $h2$ гетероструктуры GaAs—In_{0.1}Ga_{0.9}As для двух ориентаций квантовой ямы с учетом деформации показаны на рис. 1, a , b . В соответствие с изложенной выше качественной картиной, массы обеих подзон $h1$ и $h2$ в широкой напряженной пленке становятся близки к значениям $m(\langle 100 \rangle) = m_0 / (\gamma_1 + \gamma_2)$ и $m(\langle 111 \rangle) = m_0 / (\gamma_1 + \gamma_3)$. Более сильное влияние деформации на массу подзоны $h1$ в пленке

с $n \parallel (100)$ связано с деформационной компенсацией отрицательного вклада объемного спектра в дисперсию подзон. Существенное изменение массы подзоны h_2 в напряженной пленке вызвано в области малых толщин a изменением относительного положения центров подзон h_2 и l_1 . Таким образом, массы второй и последующих подзон тяжелых дырок весьма чувствительны к параметрам гетероструктуры.

Для пленок бесщелевого полупроводника формулы (20)—(22) с Φ_p в виде (16) описывают изменение масс дырочных подзон в квантовой яме конечной глубины вследствие смещения под действием деформации точек пересечения a_N состояний тяжелых дырок с состоянием S_1 . Результаты численного расчета зависимости массы подзоны h_1 для гетероструктуры CdTe—HgTe с учетом деформации слоя HgTe и туннелирования легких дырок показаны на рис. 2.

Заключение. Полученные в работе аналитические выражения для масс дырочных подзон размерного квантования пленок разной ориентации позволяют оценить влияние разных факторов (гофрировки дырочного спектра, скачка валентной зоны на гетерогранице, толщины пленки, ее деформации) на спектры подзон размерного квантования дырок и сводят к минимуму процедуру численного расчета масс дырочных подзон для квантовых ям.

Показано, что модель БГЯ дает только качественное представление о массах подзон, поскольку даже для первой подзоны тяжелых дырок отличия массы m_{h_1} от результата модели БГЯ становятся значительными, когда длина туннелирования легких дырок в область барьера сравнивается с шириной ямы $h/\sqrt{m_j\Lambda} \sim a$. Массы последующих минизон чувствительны к взаимному расположению центров подзон и потому весьма сильно зависят от ориентации пленки и глубины, ширины и деформации потенциальной ямы. Массы подзон гетероструктур типа CdTe—HgTe, содержащих слои бесщелевого полупроводника, существенно отличаются от результата модели БГЯ уже для пленок толщиной $a \leq 300 \text{ \AA}$, ввиду сильного изменения относительного положения центров подзон с изменением толщины пленки HgTe.

Воздействие деформации пленки на массы подзон размерного квантования обусловлено с одной стороны, смещением центров подзон в напряженных слоях и, с другой стороны, изменением спектра дырок в объемных материалах при деформации. Последний фактор особенно существен в достаточно толстых пленках: если энергия размерного квантования легких дырок становится меньше величины деформационного расщепления, то массы верхних подзон определяются объемным спектром в деформированном материале и не зависят от параметров потенциальной ямы.

Сравнение с результатами изотропной модели ($\gamma_2 = \gamma_3$) [16] показывает, что при малом отношении масс дырок $\beta \ll 1$ изотропное приближение неплохо описывает дисперсию подзон с малой массой $m \leq m_j$, если в качестве дырочных масс объемного спектра выбрать величины, соответствующие дисперсии дырок вдоль направления n , $m_n = m_0/\mu_n(n)$, так как при таком выборе параметров изотропной модели обеспечивается правильное расположение центров подзон размерного квантования для данной ориентации гетероструктуры. Однако при определении масс подзон со слабой дисперсией погрешность в определении масс подзон становится существенной $\delta m \sim m_b$ и необходимо использовать более точные формулы (20)—(22).

Следует отметить, что обсуждаемые в работе особенности спектров размерного квантования, связанные с взаимодействием состояний легких и тяжелых дырок, существенны в области малых импульсов движения носителей вдоль пленки $q \leq \sqrt{m_j} |\epsilon| / \hbar$. При больших значениях $q \sim \pi N/a$ спектр подзон существенно непараболический [1], далее с ростом q происходит постепенный переход подзон размерного квантования к асимптотическому поведению с $m \sim m_b$ при $q \gg \pi N/a$.

Полученные в работе аналитические результаты следует учитывать при выборе оптимальных параметров квантово-размерных гетероструктур, используемых для создания низкопороговых лазеров [19] и транзисторов с дырочным каналом высокой подвижности [20].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Л. Г. Герчиков, А. В. Субашиев. ФТП, 25, 231 (1991).
- [2] A. M. Cohen, G. E. Marques. Phys. Rev. B, 41, 1060 (1990).
- [3] D. L. Smith, C. Mailhot. Rev. Mod. Phys., 62, 173 (1990).
- [4] J. N. Shulman, Y. C. Chang. Phys. Rev. B, 36, 6574 (1986).
- [5] М. И. Дьяконов, А. В. Хаецкий. ЖЭТФ, 82, 1584 (1982).
- [6] L. G. Gerchikov, A. V. Subashiev. Phys. St. Sol. (b), 160, 443 (1990).
- [7] М. И. Дьяконов, А. В. Хаецкий. Письма ЖЭТФ, 33, 115 (1981).
- [8] С. С. Недорезов. ФТТ, 12, 2269 (1970).
- [9] L. D. Shvartsman. Sol. St. Commun., 46, 787 (1983).
- [10] О. В. Кибис, Л. Д. Шварцман. Поверхность, № 7, 119 (1985).
- [11] Г. Л. Бир, Г. Е. Пикус. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках, 584. М. (1972).
- [12] N. F. Johnson, H. Ehrenreich, K. C. Hass. Phys. Rev. Lett., 59, 2352 (1987).
- [13] В. Я. Алешкин, Ю. А. Романов. ФТП, 20, 281 (1986).
- [14] Л. Г. Герчиков, А. В. Субашиев. ФТП, 26, 178 (1992).
- [15] Л. Г. Герчиков, А. В. Субашиев. ФТП, 26, 2210 (1989).
- [16] Л. Г. Герчиков, Г. В. Рожнов, А. В. Субашиев. ЖЭТФ, 101, 286 (1992).
- [17] Y. Jiang, M. C. Teich, W. I. Wang. J. Appl. Phys., 71, 769 (1992).
- [18] M. P. C. M. Krijin. Semicond. Sci. Technol., 6, 27 (1991).
- [19] E. P. O'Reilly. Semicond. Sci. Technol., 4, 121 (1989).
- [20] B. Laikhtman, R. A. Kiehl, D. J. Frank. J. Appl. Phys., 70, 1531 (1991).

Редактор В. В. Чалдышев
