

УДК 621.315.592

ПРИГРАНИЧНЫЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ (IV—VI) СВЕРХРЕШЕТКАХ

В. Г. Канцер, Н. М. Малкова

Институт прикладной физики Академии наук Молдовы, 277028, Кишинев, Молдова
(Получена 10 апреля 1992 г. Принята к печати 22 июня 1992 г.)

В рамках двухзонной схемы метода эффективной массы рассмотрен энергетический спектр приграничных электронных состояний в сверхрешетках, сформированных из полупроводников $A^{IV}B^{VI}$ с нормальным спектром. Проведен анализ дисперсионных кривых приграничных состояний в зависимости от отношения толщин слоев a и b . Получено, что при одинаковых отношениях толщин слоев область существования приграничных состояний максимальна и уменьшается по мере уменьшения (или увеличения) одной из величин a и b . Спектр приграничных состояний при $a = b$ является почти линейным. При увеличении разности между a и b отклонение спектра от линейного становится более существенным.

1. В настоящей работе продолжается исследование электронного спектра приграничных состояний в сверхрешетках, образованных из полупроводников типа $A^{IV}B^{VI}$ с почти зеркальными дырочными и электронными зонами [1]. Предыдущая работа [2] была посвящена изучению электронных состояний приграничного типа в сверхрешетках с инверсией зон, т. е. многослойных квантовых структур, образованных из полупроводников с взаимно инвертированными спектрами. Было показано, что при выполнении условия

$$|E_{ga}|_a = |E_{gb}|_b \quad (1)$$

(где E_{ga}, b — энергетические щели в спектре исходных полупроводников, a и b — толщины слоев) энергетический спектр приграничных электронных состояний является бесщелевым и совпадает со спектром отдельного гетероконтакта с инверсией зон [2, 3]. Условие (1) является не чем иным, как условием суперсимметрии для потенциала сверхрешетки, и данные приграничные состояния представляет собой нулевую моду задачи суперсимметричной квантовой механики. В рамках такого подхода в [4] был изучен частный случай $E_{ga} = -E_{gb}$, $a = b$. Такие сверхрешетки были названы суперсимметричными. При отклонении от условия (1) электронный спектр приграничных состояний сверхрешеток с инверсией зон становится щелевым, и в зависимости от разности толщин $\Delta d = b - a$ и разности абсолютных значений энергетических щелей исходных полупроводников $\delta E_g = |E_{gb}| - |E_{ga}|$ эволюция спектра сопровождается эффектом инверсии зон приграничных состояний. При этом нулевое значение щели в спектре приграничных состояний сверхрешетки ($E_g^{SL} = 0$) соответствует случаю суперсимметричных сверхрешеток.

Изучение электронных состояний приграничного типа в гетероконтактах, образованных из полупроводников без взаимной инверсии зонного спектра ($E_{ga}E_{gb} > 0$), показало [3, 5, 6], что они могут существовать и в таких структурах.

Голько в этом случае область существования приграничных состояний ограничена конечным интервалом энергий и поперечного импульса (вдоль слоя). Энергетические ветви данных двумерных приграничных состояний располагаются на фоне разрешенных объемных зон исходных полупроводников.

В соответствии с этим естественной является постановка задачи об изучении приграничных электронных состояний в сверхрешетках, сформированных из полупроводников без взаимной инверсии зонного спектра. Особый интерес при этом представляет изучение спектра приграничных состояний сверхрешеток, для которых выполняется условие (1). Не менее важными являются и вопросы изучения эволюции спектра приграничных состояний в зависимости от соотношения толщин и энергетических щелей в спектре исходных полупроводников. Теоретическое исследование этих вопросов является очень важным для проблематики электронной структуры сверхрешеток из полупроводников типа $A^{IV}B^{VI}$, которые интенсивно изучаются экспериментально в последние годы [7], но в основном в контексте изучения традиционных квантоворазмерных состояний.

2. Согласно [1], энергетический спектр приграничных состояний сверхрешетки, сформированной из полупроводников $A^{IV}B^{VI}$ с почти зеркальными дырочными и электронными зонами, определяется следующим дисперсным уравнением

$$2\chi_a\chi_b \cos qd = (\chi_a^2 + \chi_b^2 - Q^2) \operatorname{sh}(\chi_a a) \operatorname{sh}(\chi_b b) + 2\chi_a\chi_b \operatorname{ch}(\chi_a a) \operatorname{ch}(\chi_b b), \quad (2)$$

где

$$p_{\parallel}^2 \chi_{a,b}^2 = \frac{E_{ga,b}^2}{4} + p_{\perp}^2 k_{\perp}^2 - \left(E \pm \frac{\varphi_0}{2} \right)^2, \\ Q^2 = (\Delta_2^2 - \varphi_0^2)/p_{\parallel}^2, \quad \Delta_2 = (E_{gb} - E_{ga})/2. \quad (3)$$

Уравнение (2) получено для приграничных электронных состояний сверхрешетки с ориентацией вдоль тригональной оси [111], причем эти состояния генерированы из симметричной долины (111). В выбранной здесь системе координат ось z направлена вдоль тригональной оси перпендикулярно слоям, а оси x и y лежат в плоскости слоя перпендикулярно оси [111]. В (2) и (3) введены следующие обозначения: p_{\parallel} , p_{\perp} — продольная и поперечная компоненты параметра межзонного взаимодействия (в этой работе, как и прежде [1], мы будем считать их не зависящими от состава), q — волновой вектор сверхрешетки вдоль оси z , $d = a + b$ — период сверхрешетки, $k_{\perp} = (k_x^2 + k_y^2)^{1/2}$, φ_0 — разность работ выхода. Отметим, что (2) описывает спектр приграничных состояний, поэтому $\chi_{a,b}^2 \geq 0$.

Дисперсионное уравнение для определения спектра электронных состояний других долин (или при других ориентациях сверхрешетки) имеет вид (2) с заменой $p_{\parallel}^2 \chi_{a,b}^2$ (3) на $\beta^2 \chi_{a,b}^2 = E_{ga,b}^2/4 + p_{\perp}^2 k_x^2 + p_{\parallel}^2 p_{\perp}^2 k_y^2/\beta^2 - (E \pm \varphi_0/2)^2$ и добавлением под знак \cos слагаемого αdk_y (где $\beta^2 = p_{\perp}^2 \sin^2 \vartheta + p_{\parallel}^2 \cos^2 \vartheta$, $\alpha = (p_{\parallel}^2 - p_{\perp}^2) \sin^2 \vartheta/2\beta$, ϑ — угол между осью долины и осью структуры).

Аналитическое решение трансцендентного уравнения (2) найти не удается, поэтому проанализируем несколько частных случаев. Прежде всего из (2) легко получить известное [3] дисперсионное уравнение для отдельного гетероперехода. Для этого положим $a \rightarrow \infty$ и $b \rightarrow \infty$. Тогда получаем уравнение

$$\chi_a + \chi_b = Q, \quad (4)$$

которое определяет энергетический спектр двумерных пограничных состояний на отдельном гетеропереходе

$$E_{\pm} = -\frac{\varphi_0}{2} \frac{\Delta_1}{\Delta_2} \pm p_{\perp} k_{\perp} \left(1 - \frac{\varphi_0^2}{\Delta_2^2} \right)^{1/2}, \quad (5)$$

где $\Delta_{1,2} = (E_{gb} \pm E_{ga})/2$.

Из решения уравнения (4) следует, что приграничные состояния (5) возникают только в определенных областях энергий и импульсов. В общем случае имеем

$$E \in (-(E_{ga}\Delta_2 + \varphi_0^2)/2\varphi_0^2, -(E_{gb}\Delta_2 - \varphi_0^2)/2\varphi_0) \pm k_{\perp} p_{\perp} \in \left(-\frac{E_{ga}}{2\varphi_0} (\Delta_2^2 - \varphi_0^2)^{1/2}, -\frac{E_{gb}}{2\varphi_0} (\Delta_2^2 - \varphi_0^2)^{1/2} \right). \quad (6)$$

Из (6) видно, что для инверсного контакта при $E_{ga}E_{gb} < 0$ область разрешенных значений поперечного импульса проходит через нуль, т. е. пограничные состояния могут возникать как выше, так и ниже середины запрещенной зоны. Для нормального контакта ($E_{ga}E_{gb} > 0$) область разрешенных значений k_{\perp} в зависимости от знаков E_{ga} , E_{gb} и φ_0 ограничена либо в зоне проводимости, либо в валентной зоне.

Перейдем теперь к уравнению для сверхрешетки (2) при $q=0$. Рассмотрим некоторое частное решение для выполнения условия

$$\kappa_a a = \kappa_b b. \quad (7)$$

Уравнение (7) дает уже известное решение для гетероперехода (5). Однако для сверхрешетки из всей дисперсионной кривой (5) условие (7) выделяет одну точку

$$k_{\perp}^* p_{\perp} = \frac{E_{gb} \frac{b}{a} + E_{ga}}{2 \left(1 + \frac{b}{a} \right)} \left(\frac{\Delta_2^2}{\varphi_0^2} - 1 \right)^{1/2}, \quad E^* = \frac{\varphi_0}{2} \left[\left(\frac{\Delta_2^2}{\varphi_0^2} - 1 \right) \left(\frac{a-b}{a+b} \right) - \frac{\Delta_1 \Delta_2}{\varphi_0^2} \right]. \quad (8)$$

Очевидно, при $b/a \gg 1$ (или $b/a \ll 1$) точка $k_{\perp}^* p_{\perp}$ приближается к $(k_{\perp} p_{\perp})_{\max} = \frac{E_{gb}}{2|\varphi_0|} (\Delta_2^2 - \varphi_0^2)^{1/2}$ или к $(k_{\perp} p_{\perp})_{\min} = \left[\frac{E_{ga}}{2|\varphi_0|} (\Delta_2^2 - \varphi_0^2)^{1/2} \right]$ для отдельного гетероперехода [см. (6)].

Далее проанализируем точку пересечения двух зонных парабол полупроводников, составляющих сверхрешетку. Она определяется из условия $\kappa_a = \kappa_b$ и соответствует

$$E_0 = \frac{\Delta_1 \Delta_2}{2|\varphi_0|}, \quad k_{\perp}^0 p_{\perp} = \frac{1}{2|\varphi_0|} \left(\varphi_0^4 - \frac{\varphi_0^2}{2} (E_{ga}^2 + E_{gb}^2) + \frac{1}{16} (E_{gb}^2 - E_{ga}^2)^2 \right)^{1/2}.$$

Простой анализ показывает, что при $b/a \gg 1$ (или при $a/b \gg 1$) решение (2), соответствующее $E = E_0$, приближается к k_{\perp}^0 .

Итак, при больших значениях a и b спектр приграничных состояний сверхрешетки мало отличается от спектра для отдельного гетероперехода и описывается уравнением (5) в границах по энергии и импульсу, определяемых условием (6). При уменьшении толщины одного из слоев, например a , область разрешенных значений приграничных состояний уменьшается и $k_{\perp \min} \rightarrow k_{\perp}^0$, а $k_{\perp \max} \rightarrow E_{gb}/(2|\varphi_0| p_{\perp}) (\Delta_2^2 - \varphi_0^2)^{1/2}$. Таким образом, при $a/b \ll 1$ ветка приграничных

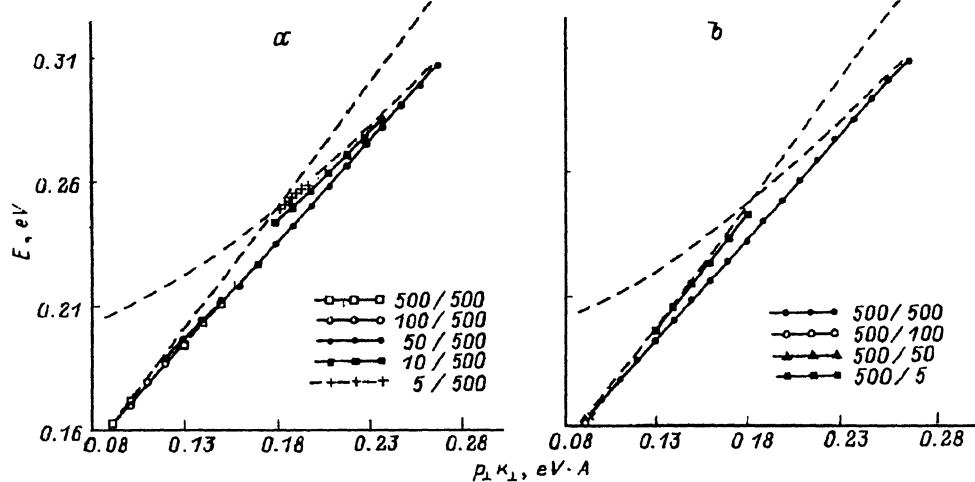


Рис. 1. Дисперсионные кривые для сверхрешеток с $E_{ga} = 0.1$ эВ, $E_{gb} = 0.5$ эВ и $E_{gb} = -0.12$ эВ для различных значений отношений толщин слоев a/b при фиксированных значениях: $a = b = 500$ и $b = a = 500$ Å. Пунктирные линии — зонные дисперсионные кривые исходных полупроводников.

состояний почти накладывается на зонные состояния второго полупроводника в указанных пределах по импульсу.

3. Проведенные качественные рассуждения проиллюстрированы на рис. 1, где показаны рассчитанные численно дисперсионные кривые для сверхрешеток с $E_{ga} = 0.1$ эВ, $E_{gb} = 0.5$ эВ и $\varphi_0 = -0.12$ эВ при разных значениях отношений толщин слоев. Здесь мы приводим дисперсионные кривые для сверхрешеток со значениями E_{ga} и E_{gb} , максимально отличающимися друг от друга, так как именно в этом случае полученные графики являются наиболее наглядными. Зависимости минимальных и максимальных разрешенных значений поперечного импульса и энергии от отношения a/b для сверхрешеток с параметрами такими же, как и на рис. 1, показаны на рис. 2. Аналогичные зависимости для сверхрешеток с меньшей разницей ширины запрещенных зон представлены на рис. 3. Из рис. 2 видно, что при $0.1 < a/b < 10$ область разрешенных приграничных

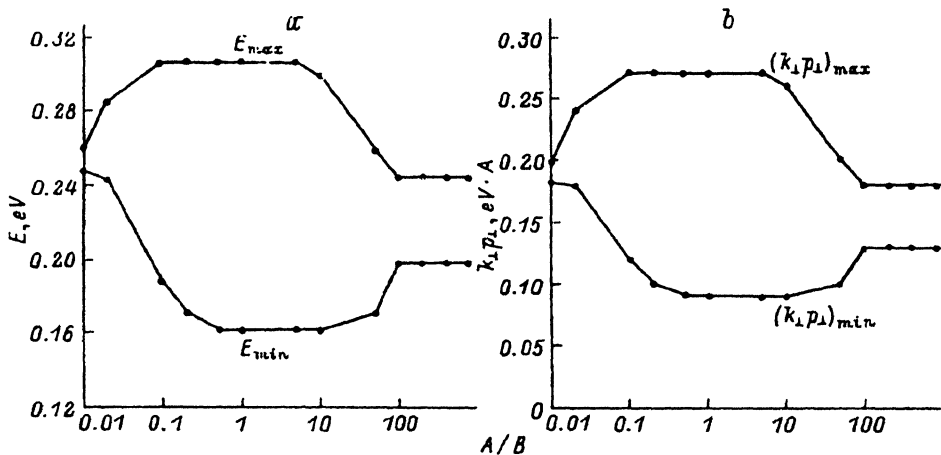


Рис. 2. Зависимости минимальных и максимальных разрешенных значений поперечного импульса (а) и энергии (б) от отношения a/b для сверхрешеток с параметрами $E_{ga} = 0.1$ эВ, $E_{gb} = 0.5$ эВ и $\varphi_0 = -0.12$ эВ.

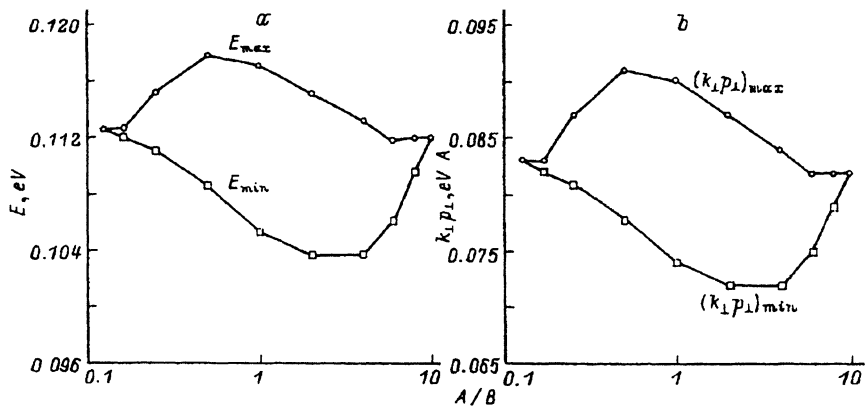


Рис. 3. То же, что и на рис. 2, но для сверхрешеток с параметрами $E_{ga} = 0.1$ эВ, $E_{gb} = 0.2$ эВ и $\varphi = -0.33$ эВ.

состояний сверхрешеток как по энергии, так и по импульсу остается практически неизменной. Однако даже в этих пределах она существенно меньше, чем у аналогичного гетероперехода, для которого, например $0.0066 < k_{\perp} p_{\perp} < 0.33$ эВ·А. При $a/b > 10$ и $a/b < 0.1$ области разрешенных значений и по энергии, и по импульсу резко уменьшаются. Для сверхрешеток с меньшей разницей E_g (рис. 3) область существования приграничных состояний типа (5) существенно уменьшается.

Итак, из проведенных исследований следует, что в нормальных сверхрешетках с $E_{ga} E_{gb} > 0$ возникают приграничные состояния, область разрешенных значений которых максимальна при одинаковых значениях толщин слоев $a = b$ и уменьшается по мере уменьшения одной из величин a или b . Спектр этих приграничных состояний при $a = b$ является почти линейным и мало отличается от спектра приграничных состояний аналогичного гетероперехода. При увеличении разности между a и b отклонение спектра от линейного становится все более существенным, и в пределе ветка приграничных состояний сливается с дисперсионной кривой соответствующего полупроводника (рис. 1).

В заключение отметим следующее. Недавно при исследовании полупроводниковых сверхрешеток на основе халькогенидов свинца было обнаружено [8], что сверхрешетки с ориентацией (100) при низких температурах проявляют сверхпроводящие свойства с аномально высокими для неметаллических систем температурами перехода. В работе [9] была предложена сверхрешеточная модель сверхпроводимости на основе приграничных состояний типа (5). Если эта модель окажется применимой к сверхрешеткам на основе полупроводников $A^{IV}B^{VI}$, то в соответствии с результатами данной работы должна существовать зависимость температуры сверхпроводящего перехода от отношения толщин слоев. С этой точки зрения принципиальным является факт экспериментального обнаружения [10] увеличения температуры сверхпроводящего перехода в сверхрешетках $PbTe/SnTe$ и $PbTe/PbS$ при увеличении толщины слоя $PbTe$.

В рамках предложенной в [9] модели сверхпроводимость возникает благодаря спариванию квазидвумерных приграничных носителей с законом дисперсии (5), который определен в ограниченном интервале по энергии (E_{\min} , E_{\max} [см. (6)]). При этом константа связи λ пропорциональна величине $0.5(E_{\min} + E_{\max})$. Как следует из проведенного в данной работе анализа и непосредственно видно из рис. 2, при уменьшении величины a/b , т. е. при увеличении толщины полупроводника с большей запрещенной зоной, величина $0.5(E_{\min} + E_{\max})$ увеличивается. В конечном итоге это должно приводить к увеличению температуры

сверхпроводящего перехода, наблюдаемому в [10]. Например, при увеличении величины $0.5(E_{\min} + E_{\max})$ на 10% температура сверхпроводящего перехода возрастает приблизительно в 1.4 раза.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] В. Г. Канцер, И. А. Леляков, Н. М. Малкова. ФТП, **26**, 1596 (1992).
- [2] O. A. Pankratov, S. V. Pakhomov, B. A. Volkov. Sol. St. Commun., **61**, 93 (1987).
- [3] Д. В. Гицу, В. Г. Канцер, И. А. Леляков. Препринт ИПФ АН МССР № 4, 39. Кишинев (1988).
- [4] Б. А. Волков, Ю. В. Караганчу. ФТТ, **32**, 2746 (1990).
- [5] М. В. Кисин. ФТП, **23**, 292 (1989).
- [6] О. Э. Райчев. ФТП, **23**, 1226 (1989).
- [7] M. A. Tamor, U. Holloway, L. C. Davis. Superlattices and Microstructure, **4**, 493 (1988).
- [8] О. А. Миронов, Б. А. Савицкий и др. Письма ЖЭТФ, **48**, 100 (1988).
- [9] В. Г. Канцер. Изв. АН МССР. Физика и техника, **2**, 12 (1990).
- [10] D. Agassi, T. K. Chu. Phys. St. Sol. (b), **160**, 601 (1990).

Редактор В. В. Чалдышев
