

## ЗОННАЯ СТРУКТУРА КОРОТКОПЕРИОДИЧЕСКИХ СВЕРХРЕШЕТОК III ТИПА

Герчиков Л. Г., Субашиев А. В., Далла Салман

Исследована трансформация спектра сверхрешетки III типа вблизи перехода полупроводник—полуметалл—полупроводник в случае большой проникаемости барьеров для легких носителей. Показано, что вследствие сильной дисперсии минизон по импульсу движения вдоль оси сверхрешетки интервал периодов, в котором спектр сверхрешетки соответствует полуметаллическому состоянию, оказывается очень широким. Кроме того, изменение порядка следования минизон приводит к существенному перераспределению плотности состояний в полуметаллической фазе.

Исследования зонной структуры и электрических свойств сверхрешеток (СР) III типа (т. е. содержащих слои бесщелевого полупроводника, например  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ — $\text{HgTe}$ ) позволили установить, что в таких СР при изменении толщин слоев происходит трансформация энергетического спектра типа полупроводник—полуметалл—непрямой полупроводник [1–5]. Было показано (см., например, [3–5]), что перестройка спектра обусловлена изменением положения специфических минизон ( $S1$  и  $S2$ ), происходящих из поверхностных состояний изолированных гетерограниц и соответствующих при большой ширине барьеров (т. е. слоев  $\text{Cd}_x\text{Hg}_{1-x}\text{Te}$ ) антисимметричной и симметричной комбинациям пограничных состояний в слое бесщелевого полупроводника. Энергия состояний  $S1$  и  $S2$  сильно зависит от ширины квантовых ям  $d_1$  (т. е. от толщины слоя  $\text{HgTe}$ ) таким образом, что при малой ширине  $d_1$  состояние  $S1$  оказывается выше первой минизоны тяжелых дырок  $h1$  и превращается в нижнюю электронную минизону. С увеличением ширины ям энергия уровня  $S1$  уменьшается, что приводит вследствие расталкивания между поверхностным состоянием  $S1$  и дырочным состоянием к резкому увеличению дисперсии минизон по импульсу движения носителей в плоскости слоев СР К, а при пересечении минизон — к перемене знака эффективных масс пересекающихся минизон. В частности, пересечение минизон  $S1$  и  $h1$  (при увеличении  $d_1$ ) превращает минизону  $h1$  в нижнюю электронную, а минизону  $S1$  — в дырочную. При дальнейшем увеличении  $d_1$  верхней дырочной становится минизона  $h2$ .

Описанное пересечение минизон проявляется в немонотонной зависимости ширины запрещения зоны СР от ее периода:  $d = d_1 + d_2$  ( $d_2$  — толщина слоев широкозонного материала, представляющих собой барьеры для носителей). Немонотонный характер поведения запрещенной зоны делает неоднозначной процедуру восстановления скачка валентной зоны на гетерогранице  $\Lambda_v$ , по данным электрических измерений [1–3, 6]. Анализ экспериментальных данных [2, 3, 6] осложняется тем, что в обычных СР с барьерами толщиной  $d_2 > 40 \text{ \AA}$  ширина минизон  $S1$  и  $S2$  оказывается небольшой ( $\sim 30 \text{ мэВ}$ ). Соответственно интервал периодов, в котором реализуются полуметаллическое состояние и состояние с растущей с увеличением периода  $d$  запрещенной зоной, оказывается весьма узким, а возникающие состояния с необычными свойствами — труднодоступными для экспериментального исследования.

В настоящей работе теоретически исследована эволюция спектра СР при изменении как ширины ям, так и ширины барьеров вблизи перехода полупроводник—металл—полупроводник в короткопериодических СР III типа с большой проницаемостью барьеров для легких носителей. Показано, что вследствие сильной дисперсии минизон по импульсу движения вдоль оси СР  $Q$  интервал периодов, в котором спектр СР соответствует полуметаллическому состоянию, оказывается очень широким. Кроме того, изменяется порядок следования минизон, что приводит к существенному перераспределению плотности состояний в полуметаллической фазе.

Качественный анализ спектра, выполненный на основе аналитического исследования дисперсионного уравнения, полученного ранее [5] методом огибающих, подтверждается его численными решениями для СР с различными толщинами слоев.

Порядок следования минизон СР, а также их ширина, соответствующая дисперсии спектра по  $Q$ , устанавливаются из решения независимых (при  $K=0$ ) дисперсионных уравнений типа Кронига—Пенни [5] для легких и тяжелых носителей, определяющих положение краев минизон при  $K=0$ ,  $Q=0$ ,  $\pi/d$ :

$$Q = 0, \quad \left( \frac{k_{v_1}}{\varepsilon - \varepsilon_{v_1}} \right)^{\pm 1} \operatorname{ctg} \frac{k_{v_1} d_1}{2} = - \left( \frac{k_{v_2}}{\varepsilon - \varepsilon_{v_2}} \right)^{\pm 1} \operatorname{ctg} \frac{k_{v_2} d_2}{2}, \quad (1)$$

$$Q = \frac{\pi}{d}, \quad \left( \frac{k_{v_1}}{\varepsilon - \varepsilon_{v_1}} \right)^{\pm 1} \operatorname{ctg} \frac{k_{v_1} d_1}{2} = \left( \frac{k_{v_2}}{\varepsilon - \varepsilon_{v_2}} \right)^{\pm 1} \operatorname{tg} \frac{k_{v_2} d_2}{2}, \quad (2)$$

где знак + соответствует четным в слоях HgTe, а — — нечетным минизонам легких ( $\nu=l$ ) и тяжелых ( $\nu=h$ ) носителей;  $\varepsilon_{v_1}$ ,  $\varepsilon_{v_2} = \varepsilon_{v_1} - \Lambda_\nu$  — положение краев валентной зоны в материале 1 (яма) и 2 (барьер);  $\varepsilon$  — энергия состояний;  $k_{v_{1,2}}$  — волновой вектор носителя сорта  $\nu=l, h$  в материалах 1 и 2 соответственно. Величины  $k_{v_{1,2}}$  (вещественные или мнимые) находятся по законам дисперсии носителей в объемных материалах. Существенно, что в случае СР III типа уравнения (1), (2) для  $\nu=l$  имеют дополнительные решения  $S1$  (нечетное при  $Q=0$ ) и  $S2$  (четное при  $Q=0$ ), которым могут соответствовать чисто мнимые значения  $k_{l_1}$ ,  $k_{l_2}$ . Положение краев минизон для СР  $\text{Cd}_{0.5}\text{Hg}_{0.5}\text{Te}$ —HgTe при ширине барьеров  $d_2 = 20 \text{ \AA}$  в зависимости от ширины ям показано на рис. 1 (использованные в расчете параметры материалов совпадают с общепринятыми, см. [7]). Начало отсчета энергии соответствует  $\varepsilon_{v_2} = 0$ . Из рис. 1 следует, что пересечение минизон  $S1$  и  $hl$  при увеличении  $d_1$  впервые происходит при  $Q=0$ . Соответствующее значение  $d_1$  обозначим через  $d_{1S}^+$ . Спектр минизон при  $d_1 < d_{1S}^+$  показан на рис. 2, а. В этой области качественное отличие спектра минизон от спектра СР с широкими барьерами (см. [1, 5, 6]) состоит лишь в сильной дисперсии легких минизон по  $Q$ . При  $d_1 > d_{1S}^+$  точка пересечения минизон  $S1$  и  $hl$   $Q=Q_0$  смещается в область больших  $Q$ . Для СР с малым отношением масс легких и тяжелых носителей  $\beta = m_l/m_h \ll 1$  и высокой прозрачностью барьеров ( $|k_{l_2} d_2| = \sqrt{2m_{l_2}\Lambda_\nu} d_2/\hbar \ll 1$ ) смещение точки  $Q_0$  (за исключением области малых значений  $Q_0 \sim |k_{l_2} d_2| \ll 1$ , когда  $|d_1 - d_{1S}^+| \sim d_{1S}^+$ ) может быть найдено из уравнения [5]

$$d_1 = \frac{2\hbar^2 \sin^2 \frac{Q_0 d}{2}}{m_{l_1} \Lambda_\nu d_2} \left[ 1 + \frac{\beta \pi^2}{4} \left( \operatorname{ctg}^2 \frac{Q_0 d}{2} + \frac{1}{3} \right) \right]. \quad (3)$$

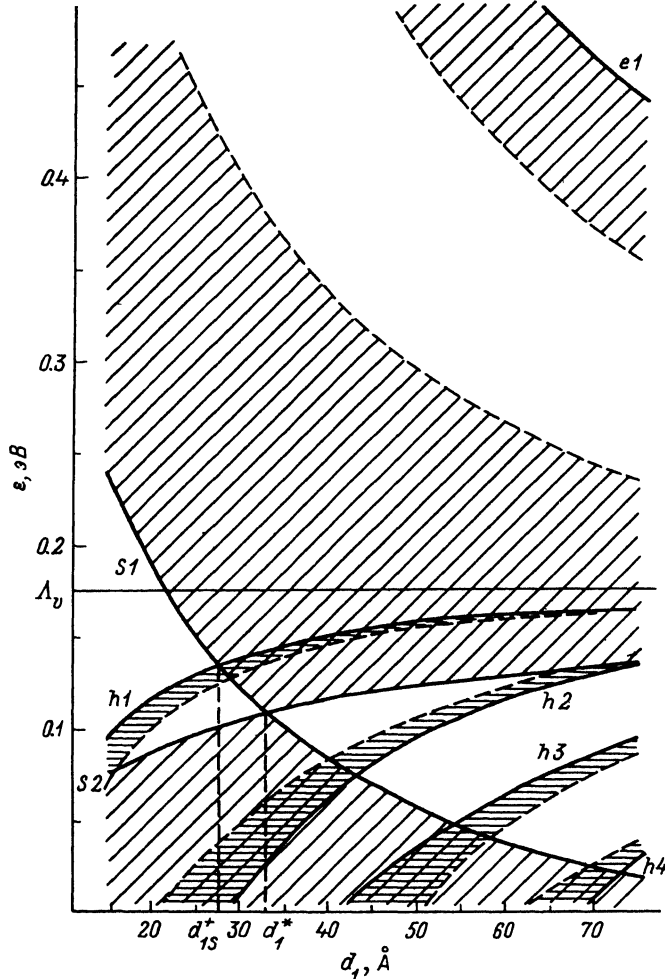


Рис. 1. Положение краев минизон ( $Q=0$  — сплошные линии,  $Q=\pi/d$  — штриховые) в  $\text{Cd}_{0.5}\text{Hg}_{0.5}\text{Te}-\text{HgTe}$  в зависимости от толщины  $d_1$  слоев  $\text{HgTe}$ .

Толщина барьеров  $d_2 = 20 \text{ \AA}$ ,  $\Lambda_v = 0.175 \text{ эВ}$ .

Сильное расталкивание пересекающихся минизон легких и тяжелых дырок в точке  $Q=Q_0$  ( $0 < Q_0 < \pi/d$ ) приводит к тому, что массы поперечного движения обращаются в нуль, а вдали от  $Q=Q_0$  имеют противоположные знаки. Значение  $Q_0 = \pi/d$  достигается при пересечении минизоны  $h1$  и верхнего края верхней минизоны пограничных состояний. Соответствующее значение ширины квантовых ям  $d_1$  обозначим через  $d_{1s}^*$ . Таким образом, во всем интервале  $d_{1s}^* < d_1 < d_{1s}$  спектр СР соответствует бесщелевому состоянию.

Вследствие слабой прозрачности барьеров для тяжелых дырок и, следовательно, экспоненциально малой дисперсии минизоны  $h1$  по  $Q$  [ $\sim \exp(-|k_{h2}d_2|)$ ] это состояние близко к полуметаллическому (с конечной плотностью состояний на уровне Ферми). В непосредственной окрестности уровня Ферми  $\epsilon_F$  имеется экспоненциально узкая [ $\sim \exp(-|k_{h2}d_2|)$ ] щель, в которой плотность состояний  $g(\epsilon) \propto (\epsilon - \epsilon_F)^2$ .

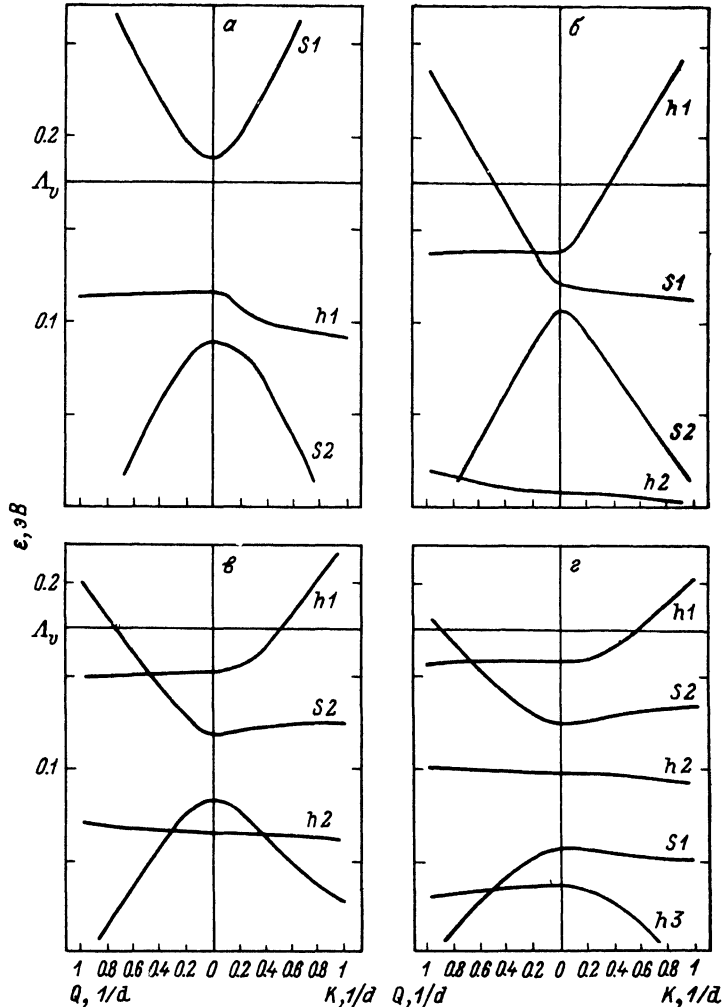


Рис. 2. Изменение спектра минизон СР при увеличении толщины слоев HgTe. Толщина барьеров  $d_2 = 20 \text{ \AA}$ ,  $\Lambda_v = 0.175 \text{ эВ}$ ;  $d_1$ ,  $\text{\AA}$ : а - 20, б - 30, в - 40, г - 50.

В СР с узкими барьерами вследствие значительной дисперсии по  $Q$  минизоны граничных состояний ширина интервала  $d_{1S}^+ < d_1 < d_{1S}^-$  (рис. 1) оказывается большой. Действительно, значения величин  $d_{1S}^+$  и  $d_{1S}^-$  в СР с  $\beta \ll 1$  близки к точкам пересечения зоны  $S1$  с уровнем  $\varepsilon_{v_1}$ :

$$d_{1S}^+ \approx \frac{m_{12}}{m_{11}} d_2 \operatorname{th}(x)/x, \quad d_{1S}^- \approx \frac{m_{12}}{m_{11}} d_2 \operatorname{cth}(x)/x, \quad (4)$$

где  $x = \sqrt{m_{12} \Lambda_v d_2^2 / 2 \hbar^2}$ . При высокой прозрачности барьеров  $x \ll 1$

$$d_{1S}^+ \approx \frac{m_{12}}{m_{11}} d_2 \left(1 - \frac{x^2}{3}\right), \quad d_{1S}^- \approx \frac{m_{12}}{m_{11}} \frac{d_2}{x^2}. \quad (5)$$

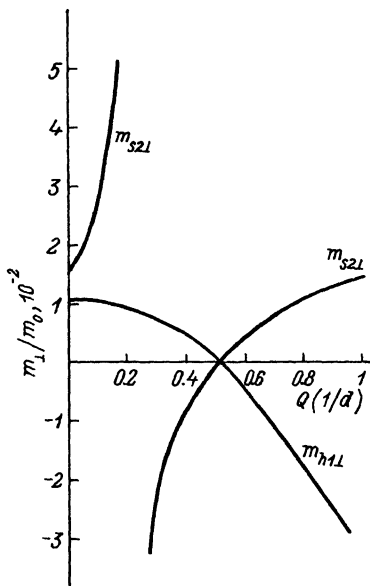


Рис. 3. Зависимость поперечных масс подзон  $m_{S2\perp}$  и  $m_{h1\perp}$  вблизи области их пересечения от импульса движения вдоль оси СР.

$d_1 = 40$ ,  $d_2 = 20$  Å,  $m_0$  — масса свободного электрона.

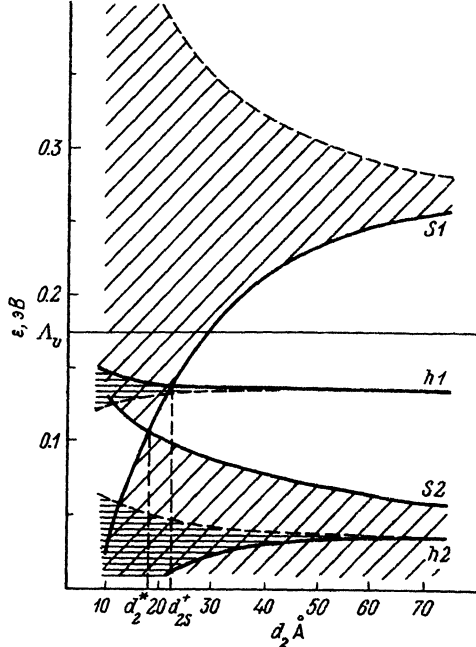


Рис. 4. Положение краев минизон СР  $\text{Cd}_{0.5}\text{Hg}_{0.5}\text{Te}$ — $\text{HgTe}$  ( $Q=0$  — сплошные линии,  $Q=\pi/d$  — штриховые) в зависимости от толщины барьеров  $d_2$ .

Толщина слоев  $\text{HgTe}$   $d_1 = 30$  Å.

Эволюция спектра при  $d_{1S}^+ < d_1 < d_{1S}^-$  определяется характером пересекающихся минизон. Анализ этого взаимодействия [4, 5] показывает, что сильное расталкивание имеется между минизонами разной четности при  $Q=0$ ,  $\pi/d$ , а взаимодействие между минизонами одинаковой четности ослаблено. Кроме того, в короткопериодической СР нижний край верхней зоны пограничных состояний  $S1$  с ростом  $d_1$  резко опускается (рис. 1), пересекая вслед за зоной  $h1$  верхний край  $S2$  нижней зоны пограничных состояний при  $d_1 = d_1^* = \frac{m_{11}}{m_{12}} d_2$ , так что точки пересечения  $d_{1S}^+$  и  $d_1^*$  близки. В интервале  $d_{1S}^+ < d_1 < d_1^*$  нижний край верхней зоны  $S1$  оказывается между минизонами  $h1$  и  $S2$ . Сильное взаимодействие с этими минизонами приводит к резкому изменению массы поперечного движения  $m_{\perp}$ . Вблизи середины интервала взаимодействия состояния  $S1$  с  $h1$  и  $S2$  комбинируются и масса  $m_{\perp}$  минизоны  $S1$  становится аномально большой (рис. 2, б). При дальнейшем увеличении  $d_1$  в широком интервале  $d_1^* < d_1 < d_{1S}^-$  нижнему краю верхней поверхностной минизоны соответствует состояние  $S2$ , четность которого совпадает с четностью нижнего края электронной (в этом интервале  $d_1$ ) минизоны  $h1$ . Слабое взаимодействие между состояниями  $h1$  и  $S2$  и их сильное отталкивание от края  $S1$  нижележащей минизоны делают поперечную массу  $m_{\perp}(Q)$  верхней минизоны пограничных состояний положительной при малых  $Q \leq x$  (рис. 2, в, з). В частности, из формул, полученных в [5], следует, что в интервале  $d_{1S}^+ \ll d_1 \ll d_{1S}^-$  при  $Q=0$

$$m_{S2\perp} = \frac{4m_{11}(d_1 - d_1^*)}{d_1 - 3\beta(d_1 - d_1^*) \text{ y ctg } y}, \quad (6)$$

где  $y = \sqrt{d_1/\beta \bar{d}_{1S}}$ . Зависимость масс  $m_1(Q)$  от  $Q$  для пересекающихся минизоны  $hl$  и минизоны пограничных состояний показана на рис. 3. Следует отметить, что вследствие слабости взаимодействия состояний  $hl$  и  $S2$  в короткопериодической СР значения их масс в области пересечения (т. е. вблизи уровня Ферми), а значит, и плотность состояний  $g(\epsilon)$  оказываются в  $1/x^2$  раз большими, чем в обычной СР при пересечении минизон  $hl$  и  $S1$ . Обращение  $m_{S2\perp}$  в бесконечность происходит при полной компенсации вкладов в дисперсию верхней минизоны от удаленного состояния  $S1$  и близлежащего, но слабо взаимодействующего с  $S2$  состояния  $hl$ . При меньших значениях  $Q$  экстремум дисперсии верхней минизоны по  $K$  сдвигается в область конечных  $K$  (рис. 2, в, г). Наличие экстремума в дисперсии  $S2$  должно приводить к появлению дополнительной особенности в плотности состояний.

Отметим, что при малом отношении масс носителей  $\beta$  описанная выше сильная трансформация спектра при изменении  $d_1$  происходит в области малых  $K \leq \beta^{1/2}/d_1$ . При больших значениях  $K \geq \pi/d_1$  минизоны приближаются к своим асимптотикам, соответствующим независимому квантованию легких и тяжелых носителей [4, 5].

На рис. 4 показана зависимость положения краев минизон от ширины барьеров  $d_2$ . Поскольку дисперсия минизон по  $K$  определяется их относительным расположением, трансформация минизонного спектра при  $x \ll 1$ , аналогичная описанной выше, имеет место и при уменьшении ширины барьеров  $d_2$  от значений

$$d_2 > d_{2s}^* = \frac{m_{11}}{m_{12}} d_1 \left(1 + \frac{x^2}{3}\right) \text{ до } d_2 < d_2^* = \frac{m_{11}}{m_{12}} d_1.$$

Описанные особенности минизонного спектра короткопериодических СР III типа, в частности сильная дисперсия поперечных масс в полуметаллической фазе, существенны при интерпретации экспериментальных данных по циклотронному резонансу [8], электрическим [2] и магнитооптическим свойствам СР [9].

Авторы благодарны С. А. Мартынову за помощь в проведении численных расчетов.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Johnson N. F., Hui P. M., Ehrenreich H. // Phys. Rev. Lett. 1988. V. 61. N 17. P. 1993—1995.
- [2] Meyer J. R., Hoffman C. A., Bartoli F. J. et al. // Phys. Rev. B. 1988. V. 38. N 3. P. 2204—2207.
- [3] Hoffman C. A., Meyer J. R., Bartoli F. J. // Phys. Rev. B. 1989. V. 40. N 6. P. 3867—3871.
- [4] Gerchikov L. G., Subashiev A. V. // Phys. St. Sol. (b). 1990. V. 160. N 2. P. 443—457.
- [5] Герчиков Л. Г., Субашиев А. В., Рожнов Г. В. // ЖЭТФ. 1992. Т. 101. В. 1. С. 286—295.
- [6] Hoffman C. A., Meyer J. R., Bartoli F. J. et al. // Phys. Rev. B. 1989. V. 39. N 8. P. 5208—5223.
- [7] Meyer J. R., Wagner R. J., Bartoli F. J., Hoffman C. A., Ram-Mohan L. R. // Phys. Rev. B. 1989. V. 40. N 2. P. 1388—1396.
- [8] Voos M. et al. // Superlatt. a. Microstruct. 1990. V. 8. N 2. P. 167—171.
- [9] Voos M., Faurie J. R. et al. // Phys. Rev. B. 1986. V. 34. N 1. P. 891—902.