

НЕМОНОТОННАЯ ЗАВИСИМОСТЬ ШИРИНЫ ЗАПРЕЩЕННОЙ ЗОНЫ В ПЛЕНКЕ БЕСЩЕЛЕВОГО ПОЛУПРОВОДНИКА

Герчиков Л. Г., Субашиев А. В.

Аналитически исследован спектр уровней размерного квантования пленки бесщелевого полупроводника в широкозонном материале. Показано, что с увеличением толщины пленки d ширина запрещенной зоны сначала уменьшается, обращаясь при некоторой толщине d_1 в нуль; затем растет при $d_1 < d < d_2$ и далее при $d > d_2$ опять убывает. Это поведение связано с перестройкой спектра, обусловленной пересечением уровня, происходящего из пограничных состояний отдельных гетерограниц, с уровнями размерного квантования.

Задача о ширине запрещенной зоны в двойной гетероструктуре — тонкой пленке бесщелевого полупроводника между слоями материала с конечной запрещенной зоной (мы будем называть его широкозонным) — актуальна как ввиду использования таких структур в ИК технике, так и ввиду ее теоретического своеобразия [1, 2]. Последнее связано с тем, что в пленке бесщелевого полупроводника при отражении носителей от границы возможно превращение легкого носителя в тяжелый. Кроме того, движение вдоль пленки существенно влияет на движение по нормали к гетерогранице. Это проявляется в существовании специфических пограничных состояний [3, 4]. В результате вопрос о снятии вырождения спектра в пленке конечной толщины и заполнении состояний становится нетривиальным.

В настоящей работе аналитически исследован спектр размерного квантования пленки бесщелевого полупроводника в широкозонном материале при малом (но конечном) отношении масс легких (m_l) и тяжелых (m_h) носителей $\beta = m_l/m_h \ll 1$.

Для описания состояний ограничимся трехзонной моделью Кейна [5], явно учитывающей состояния зоны проводимости (e), легких дырок (lh) и тяжелых дырок (hh). Ось квантования момента z выберем в плоскости пленки, направив ее перпендикулярно импульсу движения носителей вдоль пленки k_y . При этом группы состояний ($e, -1/2; lh, +1/2; hh, -3/2$) и ($e, +1/2; lh, -1/2; hh, +3/2$) становятся независимыми и их можно рассматривать отдельно.

В сферическом приближении спектр состояний легких частиц (l) в материалах 1 и 2 определяется уравнением

$$(\varepsilon - \varepsilon_{c,2})(\varepsilon - \varepsilon_{v,2} + 1/2(\gamma_1 + 2\gamma)k^2) = 2/3 P^2 k^2, \quad (1)$$

а спектр тяжелых дырок (h) имеет вид

$$\varepsilon = \varepsilon_{v,2} - 1/2(\gamma_1 - 2\gamma)k^2. \quad (2)$$

Здесь $\varepsilon_{c,2}$ и $\varepsilon_{v,2}$ — положения границ s - и p -зон в бесщелевом (1) и широкозонном (2) материалах. Для определенности рассмотрим случай $\varepsilon_{v,1} - \varepsilon_{c,2} = \Delta > 0$, когда пленка материала 1 является ямой как для электронов, так и для дырок. Кейновский матричный элемент P и константы Латтинжера γ_1, γ_2 , определяющие эффективную массу носителей, будем считать одинаковыми для

обоих материалов (рассмотрение более общего случая не вносит качественных отличий).

Уравнение для определения спектра энергий размерного квантования удобно записать через матрицу амплитудных коэффициентов отражения носителей материала 1 от границы гетероперехода $S_{\nu\nu'}$ (ϵ, k_y) ($\nu', \nu=l, h$), которая находится из граничных условий (см., например, [6, 7]). При $k_y=0$ матрица $S_{\nu\nu'}$ диагональна, так что положение центров подзон размерного квантования находится из трансцендентных уравнений

$$S_{\nu\nu} e^{i k_y d} = \pm 1, \quad (3)$$

где d — ширина пленки,

$$S_{\nu\nu} = \frac{k_{\nu 2} (\epsilon - \epsilon_{\nu 1}) - k_{\nu 1} (\epsilon - \epsilon_{\nu 2})}{k_{\nu 2} (\epsilon - \epsilon_{\nu 1}) + k_{\nu 1} (\epsilon - \epsilon_{\nu 2})}, \quad \nu = l, h,$$

$k_{\nu 1(2)}$ — нормальная к гетерогранице компонента импульса носителя «сорта» ν в материале 1 (2), определяется соотношениями (1), (2). Знак в правой части (3) соответствует четным (+) и нечетным (−) плавным огибающим блоховских функций дна валентной зоны.

Зависимость решений уравнений (3) $\epsilon_i(k_y=0)$ от d показана на рис. 1. При

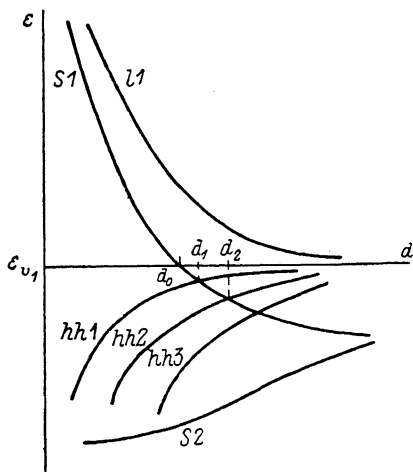


Рис. 1. Положение уровней размерного квантования $\epsilon_i(k_y=0)$ при различной толщине пленки d , представленное схематически.

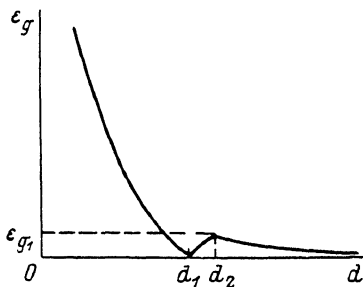


Рис. 2. Зависимость ширины запрещенной зоны от толщины пленки d .

малой толщине пленки от края зоны проводимости ϵ_{c_2} отщепляется уровень $S1$ ($\nu=l$), а от края валентной зоны ϵ_{v_2} — уровни $hh1$ ($\nu=h$) и $S2$ ($\nu=l$), причем уровень $hh1$ оказывается выше уровня $S2$. Состояние $S1$ остается пустым, а состояния $hh1$ и $S1$ — заполненными, поэтому при малых d ϵ_g определяется разностью $\epsilon_g = \epsilon_{S1}(0) - \epsilon_{hh1}(0)$. С увеличением d энергия уровня $S1$ быстро убывает, так что при $d = d_0 = \hbar(2m_{l_1}/m_{l_1}^* \Delta)^{1/2}$ этот уровень пересекает ϵ_{v_1} , а затем при близких значениях $d = d_1 = d_0 + \delta d$, $\delta d = \pi^2 \beta (1/3 + m_{l_1}/8m_{l_2}) d_0 \ll d_0$ и первый уровень размерного квантования дырки $hh1$.

При $\epsilon < \epsilon_{v_1}$ волновая функция S -состояний экспоненциально убывает при удалении от границ пленки, и при дальнейшем увеличении d состояние $S2$ сводится к симметричной, а $S1$ к антисимметричной комбинациям пограничных состояний отдельных гетерограниц.

Для выяснения поведения ϵ_g при $d \geq d_0$ необходимо рассмотреть зависимость энергий уровней от импульса движения носителей вдоль пленки $\epsilon_i(k_y)$. Соответствующее дисперсионное уравнение, учитывающее процессы трансформации носителей на границах, имеет вид

$$(\tilde{S}_{hh} - e^{2ik_{h1}d} S_{hh})(\tilde{S}_{ll} - e^{2ik_{l1}d} S_{ll}) = (\tilde{S}_{lh} - e^{i(k_{h1}+k_{l1})d} S_{lh})(\tilde{S}_{hl} - e^{i(k_{h1}+k_{l1})d} S_{hl}), \quad (4)$$

где $S_{\nu\nu'}$ (ϵ, k_y) — матрица отражения носителей от правой гетерограницы, а $\tilde{S}_{\nu\nu'}$ (ϵ, k_y) = $S_{\nu\nu'}^{-1}(\epsilon, -k_y)$ — матрица, обратная матрице отражения от левой

гетерограницы. При $d \geq d_0$ поведение ε_g определяется областью малых энергий носителей $|\varepsilon - \varepsilon_{v_1}| \sim \varepsilon_g \sim \hbar^2/m_h d^2 \ll \Lambda$ и малых импульсов продольного движения $k_y \ll \beta^{1/2}/d$. В этой области выражение для $S_{y, \nu}$ оказывается достаточно простым

$$S_{hh} = -1, \quad S_{ll} = \frac{k_{l_2}(\varepsilon - \varepsilon_{v_1}) - k_{l_1}(\varepsilon - \varepsilon_{v_2}) + ik_y \Lambda/2}{k_{l_2}(\varepsilon - \varepsilon_{v_1}) + k_{l_1}(\varepsilon - \varepsilon_{v_2}) + ik_y \Lambda/2},$$

$$S_{lh} = \frac{k_{h_1}}{k_{l_1}} S_{hl} = -\frac{i\sqrt{3}k_y}{k_{l_1} + ik_y/2}. \quad (5)$$

Подставляя (5) в (4) и оставляя в (4) наибольшие по β слагаемые, получим уравнение, описывающее четные дырочные уровни, уровень $S1$ и их пересечение:

$$k_{h_1} d \operatorname{ctg} \left(\frac{k_{h_1} d}{2} \right) \left\{ k_{l_1}^2 \left[1 - \xi + \frac{1}{2} (k_{l_1} d)^2 \left(\xi + \xi^3 \frac{m_{l_1}}{4m_{l_2}} - \frac{1}{3} \right) \right] + \frac{1}{4} k_y^2 (1 - 4\xi) \right\} + \frac{3}{2} k_y^2 = 0, \quad (6)$$

где $\xi = d_0/d$.

Анализ уравнения (6) показывает, что четные уровни размерного квантования дырок в результате сильного взаимодействия с электронными состояниями приобретают аномально малую массу $m \sim m_l$. Вычисление масс подзон размерного квантования $hh1$ и $S1$ с помощью (6) дает

$$m_{hh1} = \frac{\pi^2}{6} \frac{d - d_1}{d} m_{l_1},$$

$$m_{S1} = \frac{4(d - d_0)}{d(1 + 3 \operatorname{tg}(x)/x) - 4d_0} m_{l_1}, \quad (7)$$

где $x = \frac{\pi}{2} \left(\frac{d - d_0}{\delta d} \right)^{1/2}$. Из (7) следует, что вблизи $d = d_1$ $m_{S1} = -m_{hh1}$, поэтому после пересечения уровней $hh1$ и $S1$ масса подзоны $hh1$ становится положительной, а подзоны $S1$ — отрицательной. При увеличении k_y и $d > d_1$ энергия состояния $S1$ монотонно уменьшается $\varepsilon_{S1}(k_y) - \varepsilon_{S1}(0) \sim -k_y^2/|m_{S1}|$, а состояния $hh1$ монотонно растут. Соответственно подзона $hh1$ оказывается пустой, а $S1$ — заполненной. Поэтому, до тех пор пока $\varepsilon_{S1}(0) > \varepsilon_{hh2}(0)$, ширина запрещенной зоны в пленке равна $\varepsilon_g = \varepsilon_{hh1}(0) - \varepsilon_{S1}(0)$ и растет с ростом d (рис. 2).

Дальнейшее изменение поведения ε_g как функции d связано с пересечением уровней $S1$ и $hh2$. Отметим, что уровень $hh2$, как и другие нечетные уровни размерного квантования дырок, взаимодействует с состоянием $S1$ в $|\varepsilon - \varepsilon_{h_1}|/\Lambda \sim \beta$ раз слабее, чем четные. Поэтому в нулевом приближении в области $k_y \ll \beta^{1/2}/d$ его можно считать горизонтальным. Исключения составляют чрезвычайно узкие ($\delta\varepsilon \sim \beta^{1/2}\hbar^2/m_h d^2$) области квазипересечений этого уровня с уровнем $S1$ при конечных k_y . С ростом d при $d = d_2 = d_0 + 4\delta d$ пересечение уровней $S1$ и $hh2$ происходит при $k_y = 0$, так что уровень $hh2$ становится верхним из заполненных. Таким образом, при $d > d_2$ $\varepsilon_g = \varepsilon_{hh1}(0) - \varepsilon_{hh2}(0) \sim d^{-2}$ (рис. 2).

Более точное рассмотрение зависимости уровня энергии $hh2$ от k_y показывает, что в области $k_y \sim 1/d \gg \beta^{1/2}/d$ поведение $\varepsilon_{hh2}(k_y)$ немонотонно и имеет максимум при $k_{y \max} \approx 2.4/d$. В этой области уравнение (4) переходит в соответствующее уравнение работы [1]. Превышение $\varepsilon_{hh2}(k_{y \max}) - \varepsilon_{hh2}(0)$ составляет численно малую величину и практически не меняет картину, показанную на рис. 2. Поведение ε_g при $d > d_2$ совпадает с зависимостью $\varepsilon_g = 3\hbar^2\pi^2/2m_h d^2$, предсказанной в [1] для модели бесконечно глубокой потенциальной ямы для электронов и дырок. Оценки, проведенные для гетероструктуры HgTe—CdTe с параметрами $\Lambda = 350$ мэВ, $m_{h_1} = 0.4m_0$, $m_{l_1} = 0.03m_0$, $m_{l_2} = 0.1m_0$ (m_0 — масса свободного электрона), дают $d_1 \approx 80$ Å, $\delta d \approx 20$ Å, $\varepsilon_{g_1} = 3\hbar^2\pi^2/2m_{h_1} d_2^2 \approx 15$ мэВ.

Близкие соображения о поведении ε_g в сверхрешетках HgTe—CdTe были высказаны на основании численных расчетов в работе [8]. Вывод о немонотон-

ной зависимости ϵ_g от толщины пленки важен при интерпретации экспериментальных данных и использовании их для восстановления величины скачка валентной зоны на гетерогранице.

Список литературы

- [1] Дьяконов М. И., Хаецкий А. В. // ЖЭТФ. 1982. Т. 82. В. 5. С. 1584—1590.
- [2] Кисин М. В., Петросян В. И. // ФТП. 1988. Т. 22. В. 5. С. 829—833.
- [3] Сурис Р. А. // ФТП. 1986. Т. 20. В. 11. С. 2008—2014.
- [4] Дьяконов М. И., Хаецкий А. В. // Письма ЖЭТФ. 1981. Т. 33. В. 2. С. 115—118.
- [5] Бир Г. Л., Пикус Г. Е. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М., 1972. 584 с.
- [6] Altarelli M. // Phys. Rev. 1983. V. B28. N 2. P. 842—845.
- [7] Ando T., Mori S. // Surf. Sci. 1982. V. 113. N 1. P. 124—130.
- [8] Johnson N. F., Hui P. M., Ehrenreich H. // Phys. Rev. Lett. 1988. V. 61. N 17. P. 1993—1995.

Ленинградский
политехнический институт
им. М. И. Калинина

Получена 19.06.1989
Принята к печати 11.08.1989

