

УДК 539.21

## ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР АСИММЕТРИЧНЫХ ВАРИЗОННЫХ УЗКОЩЕЛЕВЫХ ПОЛУПРОВОДНИКОВЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУР

Е. А. Андрияшин, Ш. У. Нуцалов, А. П. Силян

*Получены уравнения, определяющие энергетический спектр электронов и дырок в двух узкощелевых полупроводниковых гетероструктурах: в пилообразной сверхрешетке и в варизонной квантовой яме. Приведены результаты численного решения этих уравнений.*

В последнее время большой интерес привлекает исследование оптических и транспортных свойств асимметричных полупроводниковых гетероструктур [1 – 3]. Спин-орбитальное взаимодействие в асимметричных узкощелевых гетероструктурах приводит к спиновому расщеплению энергетических уровней [4 – 9]. Одним из примеров асимметричной гетероструктуры является пилообразная сверхрешетка [10]. Пилообразные сверхрешетки на основе  $Al_xGa_{1-x}As$ , в которых  $x$  линейно меняется от 0 в начале периода до 0.2 в конце периода, обладают интересными переходными поляризационными свойствами [11] и могут использоваться для создания солнечных батарей [12]. Здесь стоит отметить, что в гетероструктурах, подобных сверхрешеткам  $Al_xGa_{1-x}As$ , в основном изменяется зона проводимости и изменением валентной зоны можно пренебречь. Спектр электронов и дырок таких сверхрешеток в однозонном приближении был рассчитан в работе [13].

В данной работе рассматриваются две узкощелевые варизонные асимметричные гетероструктуры: пилообразная сверхрешетка (рис. 1), варизонная квантовая яма (рис. 2). Целью настоящей работы является изучение таких особенностей энергетических спектров, которые отсутствуют у их широкозонных аналогов, а также выявление причин этих особенностей.

Для адекватного описания варизонных гетероструктур эффективным оказывается использование уравнения Шредингера, в котором масса зависит от координаты [14].

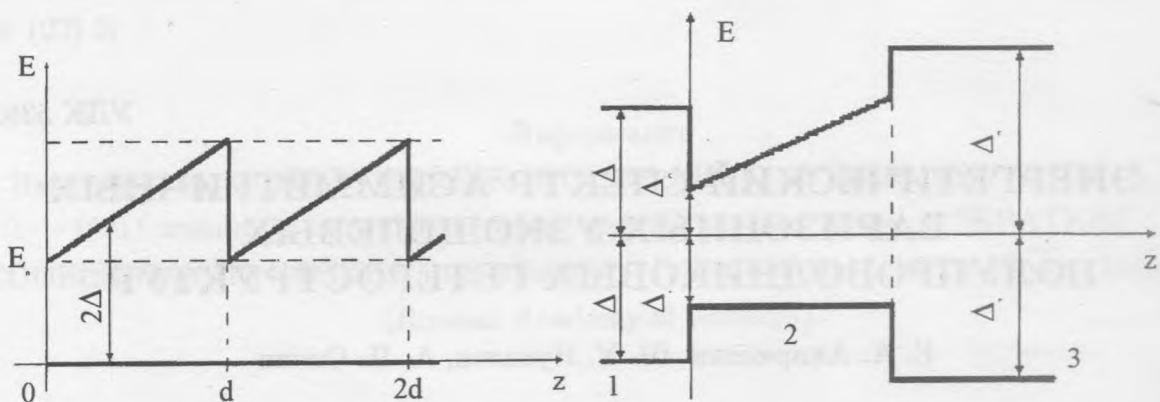


Рис. 1. Зависимость ширины энергетической щели от координаты в пилообразной сверхрешетке.

Рис. 2. Зависимость ширины энергетической щели от координаты в варизонной квантовой яме.

Однако для описания узкощелевых полупроводников  $A^{IV}B^{VI}$  необходимо использовать гамильтониан дираковского типа, в котором роль скорости света играет матричный элемент скорости межзонных переходов [15]. Мы будем использовать уравнение Дирака, приведенное в работе [16].

Энергетический спектр узкощелевых пилообразных полупроводниковых сверхрешеток. Как уже было отмечено, для расчетов гетероструктур в двухзонном приближении необходимо использовать уравнение Дирака

$$H\Psi = [\nu\gamma^0\gamma^3p_z + \nu_{\perp}\gamma^0(\gamma^1p_x + \gamma^2p_y) + \gamma^0\Delta(z) + G(z)]\Psi = E\Psi. \quad (1)$$

Здесь  $2\Delta$  – ширина запрещенной зоны,  $\gamma^0$  и  $\vec{\gamma} = (\gamma^1, \gamma^2, \gamma^3)$  – матрицы Дирака,  $\nu_{\perp}$  и  $\nu$  – кейновские матричные элементы для движения вдоль плоскостей гетероструктуры и перпендикулярно им,  $\Psi$  – биспинор,  $\vec{p} = -i\vec{\nabla}$  – оператор импульса,  $G(z)$  – работа выхода. Волновую функцию  $\Psi$  можно выбрать в виде  $\Psi = \psi(z) \exp(i\vec{r} \cdot \vec{k}_{\perp})$ , где  $\vec{k}_{\perp} = (k_x, k_y, 0)$ . Положено  $\hbar = 1$ . Следуя той же работе [16], введем оператор спиральности

$$P = i\gamma^0\gamma^3 \frac{(\vec{\gamma} \cdot \vec{k}_{\perp})}{k_{\perp}}, \quad (2)$$

имеющий собственные значения  $\lambda = \pm 1$ . Прямой подстановкой можно убедиться, что он коммутирует с исходным гамильтонианом. В качестве волновой функции гамильтониана (1) можно выбрать собственные функции оператора спиральности, так что

$$P\psi_{\lambda}(z) = \lambda\psi_{\lambda}(z),$$

и уравнение для  $\psi_\lambda$  приобретает вид

$$[-i\nu\gamma^0\gamma^3\frac{d}{dz} + \gamma^0\Delta(z) - i\gamma^3\lambda v_\perp k_\perp + G(z) - E]\psi_\lambda = 0. \quad (3)$$

Рассмотрим энергетический спектр пилообразной сверхрешетки (рис. 1), у которой  $G(z) = \Delta(z) = \frac{1}{2}(E_0 + Fz)$ ; тогда после перехода к безразмерным переменным имеем

$$z = as, \quad E = Fa\epsilon, \quad E_0 = Fa\epsilon_0, \quad K_\perp = \frac{k_\perp a v_\perp}{\nu}, \quad a^2 = \frac{\nu}{F}$$

$$\Delta(s) = G(s) = \frac{1}{2}Fa(\epsilon_0 + s) = Fag(s),$$

$$[-i\gamma^0\gamma^3\frac{d}{ds} + \gamma^0g(s) - i\gamma^3\lambda K_\perp + (g(s) - \epsilon)]\Psi_\lambda = 0. \quad (4)$$

Для последующих расчетов необходимо определиться с выбором представления матриц Дирака. Мы остановимся на представлении [17], в котором

$$i\gamma^0\gamma^3 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{vmatrix}, \quad \gamma^0 = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{vmatrix}, \quad -i\gamma^3 = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{vmatrix}$$

В этом представлении решение уравнения (4) имеет вид [18]

$$\psi_\lambda = \begin{vmatrix} \psi_1 \\ -\psi_1\lambda e^{i\theta} \\ \psi_3 \\ \psi_3\lambda e^{i\theta} \end{vmatrix}, \quad e^{i\theta} = \frac{k_x + ik_y}{k_\perp}, \quad (5)$$

$$\psi_1 = C_1 \left\{ Ai \left[ \epsilon^{1/3} \left( s + \epsilon_0 - \epsilon + \frac{K_\perp^2}{\epsilon} \right) \right] + C_2 Bi \left[ \epsilon^{1/3} \left( s + \epsilon_0 - \epsilon + \frac{K_\perp^2}{\epsilon} \right) \right] \right\},$$

$$\psi_3 = -\frac{\lambda K_\perp}{\epsilon} \psi_1 + \epsilon^{-2/3} C_1 \left\{ Ai' \left[ \epsilon^{1/3} \left( s + \epsilon_0 - \epsilon + \frac{K_\perp^2}{\epsilon} \right) \right] + C_2 Bi' \left[ \epsilon^{1/3} \left( s + \epsilon_0 - \epsilon + \frac{K_\perp^2}{\epsilon} \right) \right] \right\}.$$

Здесь  $Ai$ ,  $Bi$  – функции Эйри [18],  $C_1$  – нормировочная константа, а  $C_2$  определяется сшиванием этих решений на границе периода согласно блоховским условиям

$$\begin{vmatrix} \psi_1(0) \\ \psi_2(0) \end{vmatrix} = e^{ikd} \begin{vmatrix} \psi_1(d/a) \\ \psi_2(d/a) \end{vmatrix}, \quad (6)$$

что приводит к трансцендентному уравнению

$$2 \cos(kd) = \pi [Ai(z_1)Bi'(z_2) + Ai(z_2)Bi'(z_1) - Ai'(z_1)Bi(z_2) - Ai'(z_2)Bi(z_1)] \quad (7)$$

$$z_1 = \epsilon^{1/3} \left( \epsilon_0 - \epsilon + \frac{K_{\perp}^2}{\epsilon} \right) \quad z_2 = \epsilon^{1/3} \frac{d}{a} + z_1,$$

которое и определяет спектр. Для некоторых значений параметров ( $d/a = 0.9$ ,  $K_{\perp}^2 = 0.3$ ,  $\epsilon_0 = 0.1$ ) это уравнение было решено численно, результаты приведены на рис. 3. Ветви  $\epsilon > \epsilon_0$  соответствуют электронам, а ветви  $\epsilon < 0$  – дыркам.

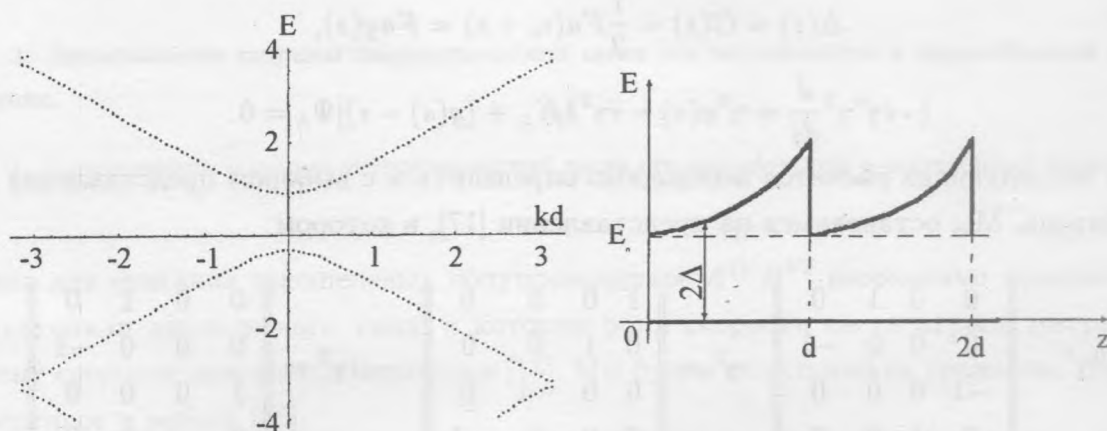


Рис. 3. Результаты численного расчета энергетического спектра пилообразной сверхрешетки.

Рис. 4. Зависимость ширины энергетической щели от координаты в произвольной гетероструктуре.

Интересно отметить, что в спектре образуются энергетические мини-щели не только в зоне проводимости (для рассчитанной гетероструктуры ширина первой мини-щели 0.138), но и в валентной зоне, где нет никакой модуляции потенциала (для рассчитанной гетероструктуры ширина первой мини-щели 0.116).

Уравнение (7) задает  $\epsilon$  как функцию  $K_{\perp}$ . Исследование функции  $\epsilon(K_{\perp})$  показывает наличие экстремума при  $K_{\perp} = 0$ .

Обращает на себя внимание то обстоятельство, что в дисперсионное уравнение (7) спиральность не вошла, следовательно, спиновое расщепление энергетических минizon в пилообразной сверхрешетке отсутствует. Эта особенность может быть получена для любой гетероструктуры, у которой дно зоны проводимости задается произвольной периодической функцией  $H(z)$  с не более, чем одним разрывом первого рода на период, а

потолок валентной зоны не меняется (рис. 4). Уравнение Дирака вновь можно свести к безразмерному уравнению

$$[-i\gamma^0\gamma^3\frac{d}{ds} + \gamma^0h(s) - i\gamma^3\lambda K_{\perp} + h(s) - \epsilon]\Psi_{\lambda} = 0, \quad (8)$$

аналогичному (4). Решение задается все тем же соотношением (5), но теперь

$$\psi_1 = C_1\{\Phi_1(s) + C_2\Phi_2(s)\}, \quad \psi_3 = -\frac{\lambda K}{\epsilon}\psi_1 + \epsilon^{-1}C_1\{\Phi_1'(s) + C_2\Phi_2'(s)\},$$

где  $\Phi_1(s)$ ,  $\Phi_2(s)$  – независимые решения некоторого дифференциального уравнения, определяемого формулой (8). Существенно, что вронскиан этих функций

$$W = \Phi_1(s)\Phi_2'(s) - \Phi_2(s)\Phi_1'(s) = \text{const.}$$

При этом дисперсионное уравнение будет выглядеть так:

$$2 \cos(kd) = W^{-1}[\Phi_1(z_1)\Phi_2'(z_2) + \Phi_1(z_2)\Phi_2'(z_1) - \Phi_2(z_1)\Phi_1'(z_2) - \Phi_2(z_2)\Phi_1'(z_1)],$$

и в него вновь не входит спиральность для произвольной функции  $H(z)$ .

Последний результат оказался довольно неожиданным. Дело в том, что отсутствие спинового расщепления было доказано ранее для гетероструктур трех типов. Гетероструктуры первого типа обладают свойством  $E_v = -E_c(-z)$ , здесь  $E_c$  – дно зоны проводимости, а  $E_v$  – потолок валентной зоны, второго –  $E_v(z) = E_v(-z)$ ,  $E_c(z) = E_c(-z)$ , а третьего –  $E_v(z) = -E_c(z)$  [19]. Пилообразная сверхрешетка ни одному из этих требований не удовлетворяет; таким образом мы имеем дело с новым типом гетероструктур, в спектре которых нет расщепления по спине, что связано с блоховскими условиями (6).

*Энергетический спектр узкощелевой варизонной квантовой ямы (рис. 2).* Вновь перейдем к безразмерным переменным в уравнении (3), на этот раз несколько иначе:

$$\delta_i = \frac{\nu_1}{\nu_i} \quad \theta_j = \frac{\Delta_j d}{\nu_1} \quad \eta_i = \frac{\nu_{\perp i}}{\nu_i} \quad \epsilon = \frac{Ed}{\nu_1} \quad s = \frac{z}{d} \quad K = k_{\perp} d \quad f = \frac{Fd}{\nu_1}$$

$i = 1, 2, 3$  – номер области,  $j = 0, 1, 2, 3$  нумерует  $\Delta$  (рис. 2).

В области 1  $\Delta(z) = \Delta$ ,  $G(z) = 0$ . Решение будем искать в виде  $\psi_1 = e^{\beta_1 x}$ ,  $\psi_3 = a_1 e^{\beta_1 x}$ . Аналогично в области 3, в которой  $\Delta(z) = (\Delta_2 + \Delta_3)/2$ ,  $G(z) = (\Delta_2 - \Delta_3)/2$ , положим  $\psi_1 = e^{-\beta_3 x}$ ,  $\psi_3 = a_3 e^{-\beta_3 x}$ . В области 2, где  $\Delta(z) = (\Delta_1 + \Delta_0 + Fz)/2$ ,  $G(z) = (\Delta_0 - \Delta_1 + Fz)/2$ , решение имеет вид

$$\psi_1 = C_1 Ai\left(\frac{s-s_0}{L}\right) + C_2 Bi\left(\frac{s-s_0}{L}\right)$$

$$\psi_3 = \left[ \lambda K_{\perp} \eta_2 \psi_1 - L^{-1} \left\{ C_1 Ai' \left( \frac{s-s_0}{L} \right) + C_2 Bi' \left( \frac{s-s_0}{L} \right) \right\} \right] \frac{1}{\delta_2(\epsilon + \theta_1)}. \quad (9)$$

Здесь  $s_0 = \frac{\delta_2^2(\epsilon + \theta_1)(\epsilon - \theta_0) - K^2 \eta_2^2}{\delta_2^2(\epsilon + \theta_1) f}$ ,  $L = [\delta_2^2(\epsilon + \theta_1) f]^{-1/3}$ .

На границах областей сшиваем решения по правилам, полученным в работе [20]:

$$\sqrt{\nu_1} \begin{vmatrix} \psi_1(0-0) \\ \psi_3(0-0) \end{vmatrix} = \sqrt{\nu_2} \begin{vmatrix} \psi_1(0+0) \\ \psi_3(0+0) \end{vmatrix}, \quad \sqrt{\nu_2} \begin{vmatrix} \psi_1(1-0) \\ \psi_3(1-0) \end{vmatrix} = \sqrt{\nu_3} \begin{vmatrix} \psi_1(1+0) \\ \psi_3(1+0) \end{vmatrix}$$

и получаем дисперсионное уравнение

$$\begin{aligned} & [Ai(s_2)Bi(s_1) - Ai(s_1)Bi(s_2)] \cdot [\lambda K \eta_2 + a_1 \delta_2(\epsilon + \theta_1)] \cdot [-\lambda K \eta_2 + a_3 \delta_2(\epsilon + \theta_1)] + \\ & + [Ai'(s_1)Bi(s_2) - Ai(s_2)Bi'(s_1)] \cdot [\lambda K \eta_2 - a_3 \delta_2(\epsilon + \theta_1)] L^{-1} + \\ & + [Ai(s_1)Bi'(s_2) - Ai'(s_2)Bi(s_1)] \cdot [\lambda K \eta_2 - a_1 \delta_2(\epsilon + \theta_1)] L^{-1} + \\ & + [Ai'(s_2)Bi'(s_1) - Ai'(s_1)Bi'(s_2)] L^{-2} = 0. \end{aligned} \quad (10)$$

Анализ последнего уравнения показывает, что если дно зоны проводимости на участках 1 и 3 одинаково, а потолок валентной зоны вообще не зависит от координаты (т.е.  $\theta = \theta_1 = \theta_2 = \theta_3$ ), то все члены, содержащие  $\lambda$ , сокращаются. Следовательно, спиновое расщепление в энергетическом спектре варизонной квантовой ямы при этих условиях отсутствует. Аналогично тому, как это сделано для пилообразной сверхрешетки, можно показать, что этот результат не зависит от того, как изменяется дно зоны проводимости на втором участке гетероструктуры.

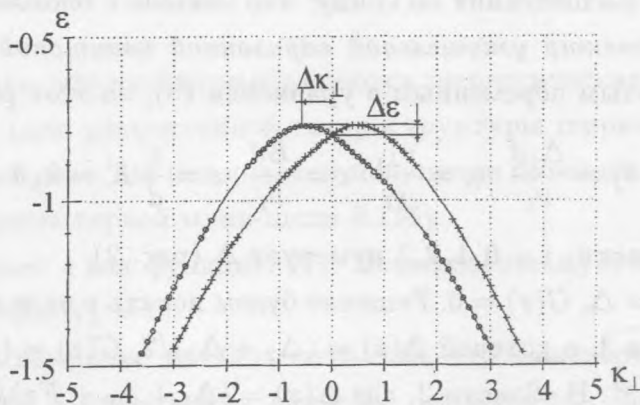
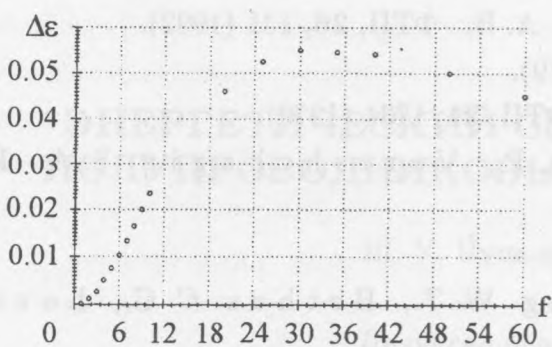
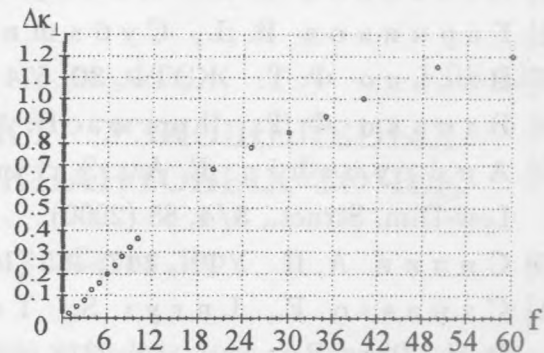


Рис. 5. Зависимость энергии электронов от поперечного импульса.

Рис. 6. Зависимость спинового расщепления по энергии от наклона  $f$ .Рис. 7. Зависимость спинового расщепления по импульсу от наклона  $f$ .

Если одно из указанных выше условий нарушено, в спектре, определяемом уравнением (10), появляется расщепление по спину. Это уравнение было решено численно для варизонной гетероструктуры с параметрами  $\eta_1 = \eta_2 = \eta_3 = \delta_2 = \delta_1 = 1$ ,  $\theta = 0.8$ ,  $\theta_0 = 0.1$ ,  $\theta_1 = 0.5$ ,  $\theta_2 = \theta_3 = 1.1$ ,  $f = 3$ . Решение для дырок показано на рис. 5. Величину спинового расщепления удобно характеризовать параметрами  $\Delta K_{\perp}$  и  $\Delta \epsilon$ . На рис. 6 и 7 показано, как они зависят от наклона  $f$ , когда остальные параметры гетероструктуры не меняются. Видно, что есть область оптимального значения  $f \approx 30$ , при котором  $\Delta \epsilon$  максимально.

Настоящая работа выполнена при частичной поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (грант 00-02-17529) и стипендии им. Л. Д. Ландау, предоставленной KFA Forschungszentrum Julich GmsH.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] P f e f e r P., Z a v a d z k i R. Proc. 23d Int. Conf. Phys. Semicond., **3**, p. 1815. World Scientific, Singapore, 1996.
- [2] А н д р ю ш и н Е. А., В е р е щ а г и н С. А., С и л и н А. П. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 6, 21 (1999).
- [3] И в ч е н к о Е. Л., Л я н д а - Г е л л е р Ю. Б., П и к у с Г. Е. ЖЭТФ, **98**, 989 (1990).
- [4] В у с h k o v Yu. A., R a s h b a E. I. J. Phys. C, **17**, 6039 (1984).

- [5] Дьяконов И. М., Качоровский В. Ю. ФТП, **20**, 178 (1986).
- [6] Герчиков В. Л., Субашиев А. В. ФТП, **26**, 131 (1992).
- [7] Васько Ф. Т. ЖЭТФ, **30**, 574 (1979).
- [8] Васько Ф. Т., Прима Н. А. ФТП, **21**, 1734 (1979).
- [9] Andryushin E. A., Silin A. P., Vereshchagin S. A. Phys. Low-Dim. Struct., **3/4**, 85 (2000).
- [10] Силин А. П. УФН, **147**, 485 (1985).
- [11] Capasso F., Luryi S., Tsang W. T., Bethea C. G., Levine V. F. Phys. Rev. Lett., **51**, 2318 (1983).
- [12] Андрюшин Е. А., Силин А. П. УФН, **161**, 129 (1991).
- [13] Лобаев А. Н., Силин А. П. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 1, 19 (1985).
- [14] Kolesnikov A. V., Silin A. P. Phys. Rev. B, **59**, 7596 (1999).
- [15] Абакумов V. N., Pegel V. I., Yassievich I. N. Nonradiative Recombination in Semiconductors/: Elsevier Science Publishers B. V., 1991.
- [16] Волков Б. А., Идлис Б. Г., Усманов М. Ш. УФН, **165**, 7 (1995).
- [17] Ахиезер А. И., Берестецкий В. Б. Квантовая электродинамика. М., Государственное изд-во физ.-мат. литературы, 1959.
- [18] Идлис Б. Г., Усманов М. Ш. ФТП, **26**, 329 (1992).
- [19] Kolesnikov A. V., Silin A. P. J. Phys.: Condens. Matter, **9**, 10929 (1997).
- [20] Силин А. П., Шубенков С. В. ФТТ, **40**, 1345 (1998).

Поступила в редакцию 27 декабря 2000 г.