

УДК 530.145

ПРИГРАНИЧНЫЕ СОСТОЯНИЯ В ИНВЕРСНЫХ ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ ПОЛУПРОВОДНИКОВ С ДВУХЗОННЫМ СПЕКТРОМ: НЕОДНОРОДНЫЕ ПОЛЯ, НУЛЕВАЯ МОДА И СУПЕРСИММЕТРИЯ

В. С. Виноградов

Анализируются приграничные состояния в инверсных переходах полупроводников типа IV – VI в условиях, когда переход образуется в результате совместного действия неоднородных полей – параметра щели, работы выхода и "вектора поляризации". Устанавливается общая связь между полями, приводящая к возникновению в спектре нулевой моды – локализованного состояния с безмассовым спектром. Эта связь отличается от более жесткой связи, вытекающей из условий суперсимметрии. Обсуждается возможность экспериментальной реализации перехода с нулевой модой.

В работах [1 – 4] анализировались приграничные состояния (ПС) в инверсных гетеропереходах полупроводников с двухзонным спектром (полупроводники IV – VI). Были рассмотрены случаи, когда меняет знак параметр щели, вектор сегнетоэлектрической поляризации и другие. Было показано, что возникающие в этих случаях гамильтонианы удовлетворяют требованиям суперсимметрии, а ПС – локализованные на границе состояния с безмассовым спектром – являются нулевыми модами (НМ) этих гамильтонианов [5]. В работе [6] было установлено, что рассмотренные в [1, 2, 4] типы неоднородных параметров (назовем их неоднородными полями (НП)) связаны друг с другом. Следовательно, при рассмотрении ПС необходимо учитывать совместное действие НП.

В данной работе получена общая связь между НП, приводящая к возникновению НМ, т.е. установлены условия существования НМ (УСНМ). Также показано, что УСНМ отличаются от более жестких условий, накладываемых на НП суперсимметрией (УС).

УС были ранее установлены в [7]. В заключение обсужден вопрос о принципиальной возможности изготовления гетеропереходов с НМ и сравнены спектры гетеропереходов, удовлетворяющих УСНМ и им не удовлетворяющих.

Упростим, прежде всего, двухзонные уравнения с НП (8) работы [6] для случая, когда НП – параметр щели Δ , работа выхода φ и вектор поляризации $\mathbf{Q} = (0, 0, Q)$ зависят от одной координаты z . Будем искать решение уравнения (8) в виде

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{\mu\lambda} C_{\mu\lambda}(z) \psi_{\mu\lambda} \exp(ik_x x + ik_y y), \quad (1)$$

где

$$\psi_{\mu\lambda} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \psi(\lambda) \\ \mu\psi(-\lambda) \end{pmatrix}, \quad \psi(\lambda) = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -i\lambda \exp(-i\varphi/2) \\ \exp(i\varphi/2) \end{pmatrix},$$

$\mathbf{p}_\perp = \hbar \mathbf{k}_\perp = \hbar(k_x, k_y, 0) = \hbar k_\perp (\cos\varphi, \sin\varphi, 0)$ – поперечная часть импульса; $\mu = \pm 1$; $\psi(\lambda)$ – собственные функции оператора спиральности $\hat{S} = ([\mathbf{e}_z \hat{\mathbf{p}}] \vec{\sigma}) / p_\perp$, $\mathbf{e}_z \| z$ – единичный вектор, $\hat{S}\psi(\lambda) = \lambda\psi(\lambda)$, $\lambda = \pm 1$. Подставив (1) в (8) и беря от полученного выражения матричные элементы по $\psi_{\mu\lambda}$ ($\mu = \pm 1$, $\lambda = \pm 1$), получим вместо системы уравнений 4×4 две системы уравнений 2×2

$$\begin{pmatrix} c - \hat{\mathcal{P}}_z & a - ib \\ a + ib & c + \hat{\mathcal{P}}_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{1\lambda} \\ C_{-1\lambda} \end{pmatrix} = 0 \quad (\lambda = \pm 1), \quad (2)$$

где $a = \Delta(z) + \lambda h_s(z)$, $b = p - Q(z)$, $p = \lambda P_\perp$, $P_\perp = \hbar v_\perp (k_x^2 + k_y^2)^{1/2}$, $c = \varphi(z) + \lambda h_a(z) - \epsilon$, $\hat{\mathcal{P}}_z = -il_0 \nabla_z$, $l_0 = \hbar v_{||} / \Delta_0$, ϵ – собственное значение энергии, малые члены $\lambda h_{a,s}$ возникают из-за спин-орбитального взаимодействия [6]. Мы ими будем пренебрегать. В (2) мы перешли к безразмерным единицам, поделив все энергии на значение параметра щели вдали от перехода Δ_0 .

Выведем теперь общую связь между НП, вытекающую из УСНМ. Для этого рассмотрим систему однородных слоев с различными значениями параметров a_i , b_i , c_i , разделенных резкими границами. Будем требовать, чтобы эта система как целое содержала ровно одно невырожденное локализованное состояние (таково свойство НМ [5]). Потом совершим переход к непрерывной системе.

Рассмотрим сначала две области $i = 1, 2$ и одну границу. Решение системы (2) ищем в виде $C_{\mu\lambda}^{(i)}(z) = C_{\mu\lambda}^{(i)}(0) \exp(\kappa_i z / l_0)$, где $\kappa_i = S_i (a_i^2 + b_i^2 - c_i^2)^{1/2}$, $S_1 = 1$, $S_2 = -1$. Из граничных условий $C_{\mu\lambda}^{(1)}(0) = C_{\mu\lambda}^{(2)}(0)$ получим уравнения

$$\begin{aligned}\kappa_1\delta &= \alpha_1c_2 - \beta c_1, \\ -\kappa_2\delta &= \alpha_2c_1 - \beta c_2,\end{aligned}\quad (3)$$

где $\alpha_i = a_i^2 + b_i^2$, $\beta = a_1a_2 + b_1b_2$, $\delta = a_1b_2 - a_2b_1$. Выражение для закона дисперсии локализованной моды $\epsilon_l(p)$ ($p = \lambda P_\perp$) можно получить, используя выражение для κ_i и одно из уравнений (3). Удобно ввести тригонометрические обозначения $\sin\theta_{12} = (Q_2 - Q_1)/R$, $\cos\theta_{12} = (a_2 - a_1)/R$, $\sin\psi_{12} = (\varphi_2 - \varphi_1)/R$, $\cos\psi_{12} = [1 - (\varphi_2 - \varphi_1)^2/R^2]^{1/2}$, где $R = [(a_2 - a_1)^2 + (Q_2 - Q_1)^2]^{1/2}$. Применяя эти обозначения, получим два эквивалентных выражения для $\epsilon_l(p)$

$$\epsilon_l(p) = \varphi_i - S_{12}(a_i\sin\tilde{\theta}_{12} + b_i\cos\tilde{\theta}_{12}) \quad (i = 1, 2), \quad (4)$$

где $\tilde{\theta}_{12} = \theta_{12} + S_{12}\psi_{12}$, $S_{12} = \pm 1$.

Можно показать, что линейная функция $\epsilon_l(p)$ касается ветвей спектра свободных электронов и дырок при $k_z = 0$ $\epsilon = \varphi_i \pm [a_i^2 + b_i^2]^{1/2}$. Точки касания имеют координаты

$$p_i = a_i\text{ctg}\tilde{\theta}_{12} + Q_i, \quad \epsilon_l(p_i) = \varphi_i - S_{12}a_i/\sin\tilde{\theta}_{12}. \quad (5)$$

Аналогично записываются функции $\kappa_i(p)$

$$\kappa_i(p) = S_{12}(a_i\cos\tilde{\theta}_{12} - b_i\sin\tilde{\theta}_{12}) = S_{12}\sin\tilde{\theta}_{12}(p_i - p). \quad (6)$$

Так как функции $\kappa_i(p)$ линейны по p , то их ход удобно определять по двум точкам, где

$$\kappa_1(p_1) = 0, \quad \kappa_1(p_2) = -S_{12}R\cos\psi_{12}, \quad \kappa_2(p_2) = 0, \quad \kappa_2(p_1) = S_{12}R\cos\psi_{12}$$

($\cos\psi_{12} > 0$). Знак S_{12} и область изменения p определяются из требования $\kappa_1(p) > 0$, $\kappa_2(p) < 0$. Оказывается, что $S_{12} = -1$ и $p_1 < p < p_2$ ($p_1 < p_2$), $p_2 < p < p_1$ ($p_2 < p_1$).

На рис. 1 изображены ветви спектра свободных частиц для областей 1, 2 при $k_z = 0$ и спектр ПС - функция $\epsilon_l(p)$ ($p_1 < p < p_2$) в случае, когда $a_1 > 0$, $a_2 < 0$, $Q_1 \leq Q_2$, $\varphi_1 \neq 0$, $\varphi_2 = 0$.

Рассмотрим теперь три области $i = 1, 2, 3$ и две границы. Как и в предыдущем случае решения во всех областях будем искать в виде одной экспоненты. Удовлетворяя граничным условиям на границе 23, получим выражения, аналогичные (4) - (6), только индексы должны быть заменены: $1 \rightarrow 2$, $2 \rightarrow 3$, $i \rightarrow j$ ($j = 2, 3$). Потребуем, далее,

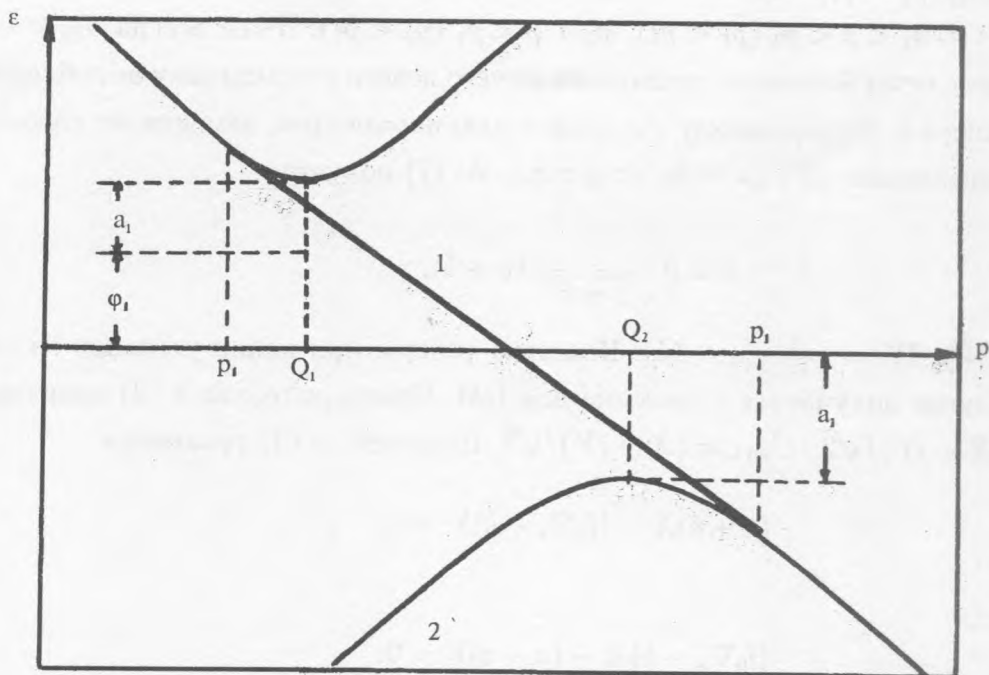


Рис. 1. Спектральные зависимости $\epsilon(p)$ для резкой границы. $p \sim \lambda |\mathbf{p}_\perp|$, \mathbf{p}_\perp - поперечный импульс, $\lambda = \pm 1$ - спиральность. 1, 2 - ветви спектра свободных частиц при $p_z = 0$ в областях 1 и 2, l - спектр локализованных приграничных состояний $\epsilon_l(p)$ ($p_1 < p < p_2$).

чтобы волновые функции в области 2, рассчитанные исходя из граничных условий на границах 12 и 23, совпадали, т.е.

$$C_{\mu\lambda}^{(2)}(12)\exp(\kappa_2^{(12)}z/l_0) = C_{\mu\lambda}^{(2)}(23)\exp(\kappa_2^{(23)}z/l_0).$$

Отсюда получим $\kappa_2^{(12)}(p) = \kappa_2^{(23)}(p)$, $\epsilon_l^{(12)}(p) = \epsilon_l^{(23)}(p)$ и, следовательно, $S_{12}\sin\tilde{\theta}_{12} = S_{23}\sin\tilde{\theta}_{23}$, $S_{12}\cos\tilde{\theta}_{12} = S_{23}\cos\tilde{\theta}_{23}$. Из двух последних равенств следует

$$\text{tg}\tilde{\theta}_{12} = \text{tg}\tilde{\theta}_{23} = k \equiv \text{const}. \quad (7)$$

Знаки S_{12} , S_{23} и область p для ПС определяются, исходя из условий $\kappa_2^{(12)}(p) = \kappa_2^{(23)}(p)$, $\kappa_1(p) > 0$, $\kappa_3(p) < 0$, аналогично тому, как это делалось для одной границы. Знаки S_{12} , S_{23} могут быть различными и зависят от порядка следования величин p_i вдоль оси p . Их удобно определять с помощью соотношений $S_{12}\sin\tilde{\theta}_{12} = S_{23}\sin\tilde{\theta}_{23}$,

$\sin\tilde{\theta}_{ij} = R_{ij}\cos\psi_{ij}/(p_j - p_i)$. Область существования ПС определяется значениями p_i крайних слоев, т.е. $p_1 < p < p_3$ ($p_1 < p_3$), $p_3 < p < p_1$ ($p_3 < p_1$). В ней всегда $S_{13} = -1$.

Рассмотрение случая большего числа слоев ничего нового к сказанному не добавляет.

Перейдем теперь к непрерывному распределению параметров, заменив их конечные разности на производные по z ($\dot{a} = da/dz$ и т.д.). Из (7) получим

$$\dot{c} = S \frac{1}{\sqrt{1+k^2}}(k\dot{a} + \dot{b}), \quad (8)$$

где $S = -\text{sign}(\dot{W})$, $W = \frac{1}{\sqrt{1+k^2}}(a - kb)$. Выясним теперь, при каких условиях из (2) в непрерывном случае получается уравнение для НМ. Предварительно в (2) произведем замену $C_{1\lambda} = (X + iY)/\sqrt{2}$, $C_{-1\lambda} = (X - iY)/\sqrt{2}$. Получим из (2) уравнения

$$\begin{aligned} (a + c)X - (l_0\nabla_z + b)Y &= 0, \\ (l_0\nabla_z - b)X - (a - c)Y &= 0, \end{aligned} \quad (9)$$

Проинтегрировав (8), получим

$$c = S \frac{1}{\sqrt{1+k^2}}(ka + b) + c_0, \quad (10)$$

где $c_0 = \text{const}$. Подставим (10) в (9), умножим второе уравнение на неопределенный множитель q и сложим с первым. Подберем q так, чтобы для некоторой линейной комбинации X и Y при определенном c_0 получалось уравнение первого порядка. Эта задача имеет единственное решение при $q = S\sqrt{1+k^2} + k$. В результате получим уравнения

$$\begin{aligned} (l_0\nabla_z + SW + c_0/q)\phi &= -(c_0/q)(1 + q^2)Y, \\ (l_0\nabla_z - SW - c_0/q)Y &= (1/q)(a + c)\phi, \end{aligned} \quad (11)$$

где $\phi = qX - Y$.

Если $W(z)$ имеет различные знаки при $z \rightarrow \pm\infty$, то первое уравнение (11) при $c_0 = 0$ всегда дает растущее на бесконечности решение. Откажемся от этого решения, положив $\phi = 0$. Тогда второе уравнение для $Y(z)$ является уравнением для НМ [5]. Функция $Y(z) \rightarrow 0$ при $|z| \rightarrow \infty$.

При $c_0 \neq 0$ из (11) получим

$$\{-(l_0 \nabla_z)^2 + (SW + c_0/q)^2 - Sl_0 \dot{W}\} \phi = (c_0/q^2)(1 + q^2)(a + c)\phi. \quad (12)$$

Это уравнение совпадает с уравнением суперсимметричной квантовой механики Виттена только в том случае, когда $a + c$ не зависит от z . Из этого требования следует дополнительная связь между полями

$$qa(z) - Q(z) = k_1 \quad (k_1 = \text{const}). \quad (13)$$

Итак, показано, что связь (10) при $c_0 = 0$ (УСНМ) приводит к уравнению для НМ, а при $c_0 \neq 0$ и дополнительном условии (13) – к уравнению Виттена. В этом последнем случае связь между НП совпадает с полученной в [7].

Обсудим теперь вопрос о том, можно ли изготовить гетероструктуру с НМ в спектре. Возьмем, например, полупроводник $Pb_{1-x}Sn_xTe$ и будем менять концентрацию Sn вдоль z в соответствии с законом $C(z) = C_0(1 - \exp(-\gamma z))$. Подставим эту зависимость в формулы (11) работы [6], в области $0 \leq z < \infty$ получим $a(z) = a_0 + \Delta a(1 - \exp(-\gamma z))$, $\varphi(z) = \varphi_0(1 - \exp(-\gamma z))$, $Q(z) = Q_0 \exp(-\gamma z)$ (a_0 и $a_0 + \Delta a$ отличаются знаками) и $a(z) = a_0$, $\varphi(z) = 0$, $Q(z) = 0$ в области $-\infty < z < 0$. Во всей области $-\infty < z < \infty$ соотношение (10) ($c_0 = 0$) не соблюдается из-за скачка $Q(z)$ в точке $z = 0$, однако растягивая переход ($L = \gamma^{-1} \rightarrow \infty$), можно точку z_0 , где функция $W(z)$ меняет знак ($W(z_0) = 0$), достаточно удалить от точки $z = 0$. В этом случае поправка к $\epsilon_l(p)$ из-за нарушения УСНМ $-\Delta \epsilon_l \sim Q_0(l_0 \gamma)^{1/2} \exp(-g/l_0 \gamma)$ ($g \sim 1$) становится сколь угодно малой. Сам спектр ПС находится из (10) при $c_0 = 0$. Он подобен изображенному на рис. 1. Константа k в (10) однозначно определяется через Δa , φ_0 , Q_0 ($\Delta a^2 + Q_0^2 > \varphi_0^2$)¹.

Если при конструировании гетероперехода использовать более жесткое УС, то придется обеспечить равенство $\varphi_0 = -\Delta a$. Интервал p , где существует НМ, в этом случае сильно зависит от величины Q_0 . При $Q_0 \rightarrow 0$ он сжимается в точку. Таким образом, использование УС вместо УСНМ затрудняет конструирование гетероперехода и наблюдение НМ. Отметим однако, что оно позволяет легко рассчитать полный спектр перехода, а не только НМ.

Рассмотрим также пример модели "реального" перехода с дискретным изменением параметров, в котором УСНМ не соблюдены: $a_1 > 0$, $\varphi_1 = 0$, $Q_1 = 0$; $a_2 = 0$, $Q_2 \neq 0$, $\varphi_2 \neq 0$; $a_3 = -a_1$, $\varphi_3 = 0$, $Q_3 = 0$. Спектр такого перехода изображен на рис. 2.

¹В эксперименте работу выхода φ_0 можно попытаться минимизировать подбором пар элементов A_1C и B_1D , а также состава четверного твердого раствора $A_{1-x}B_{1-y}C_xD_y$.

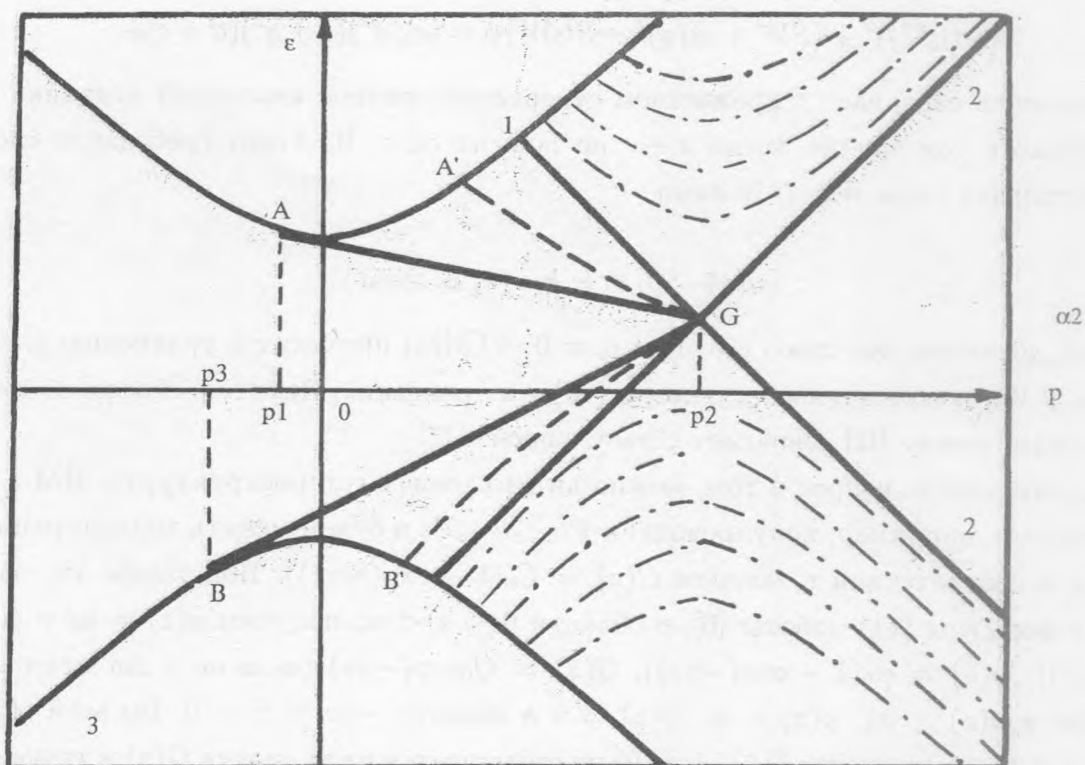


Рис. 2. Спектральные зависимости $\epsilon(p)$ для "реального" инверсного перехода. 1, 2, 3 – ветви спектра свободных частиц при $p_2 = 0$ в областях 1, 2 и 3; линии AG, BG и A'G, B'G – спектры приграничных состояний при ширине переходной области $2d = \infty$ и $d \neq \infty$, соответственно. Штрих-пунктирные линии – "ямные состояния" $p_2 = Q$.

Он содержит уже две ветви ПС, которые при ширине области $2d = \infty$ линейны по p (линии AG и BG). При $d \neq \infty$ спектры ПС становятся нелинейными (пунктирные линии A'G, B'G). Спектры ПС в реальном переходе, где параметры изменяются непрерывно, должны быть еще более сложными.

Таким образом, спектры ПС инверсных переходов, удовлетворяющих УСНМ (или УС) отличаются от остальных тем, что имеют наиболее простую структуру и линейную ("безмассовую") зависимость от поперечного импульса.

Очень интересной задачей является изготовление и экспериментальное исследование таких переходов.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] Волков Б. А., Панкратов О. А., Письма в ЖЭТФ, **42**, 145 (1985).
- [2] Волков Б. А., Панкратов О. А., Письма в ЖЭТФ, **43**, 99 (1986).
- [3] Панкратов О. А., Письма в ЖЭТФ, **45**, 82 (1987).
- [4] Панкратов О. А., Ракхотов С. В., Волков В. А., Solid State Comm., **61**, 93 (1987).
- [5] Генденштейн Л. Э., Криве И. В., УФН, **146**, 553 (1985).
- [6] Виноградов В. С. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 7-8, 62 (1995).
- [7] Идлис Б. Г., Мусаханов М. М., Усманов М. Ш., ТМФ, **101**, 47 (1994).

Поступила в редакцию 26 апреля 1995 г.