Физика твердого тела, 1998, том 40, № 7

Граничные условия для узкощелевых гетероструктур, описываемых уравнением Дирака

© А.П. Силин, С.В. Шубенков

Физический институт им. П.Н. Лебедева Российской академии наук,
117924 Москва, Россия

(Поступила в Редакцию 15 сентября 1997 г.)

Получены граничные условия для узкощелевых гетероструктур, составленных из полупроводников, энергетический спектр которых описывается уравнением Дирака. Рассмотрен случай осевой анизотропии массы носителей тока. Для анизотропных гетероструктур обобщен оператор спиральности, собственное значение которого сохраняется для всей гетероструктуры.

Хорошо известно [1], что для описания целого ряда узкощелевых полупроводников, таких, например, как полупроводники групп A^3B^5 и A^4B^6, используется уравнение, аналогичное уравнению Дирака в квантовой электродинамике, при этом роль скорости света играет матричный элемент скорости для межзонных переходов. При описании узкощелевых гетероструктур возникает вопрос о граничных условиях. Уравнение Дирака является уравнением первого порядка, и поэтому на первый взгляд на границе должна быть непрерывной волновая функция. Однако в том случае, когда при переходе через границу меняется множитель при производной высшего порядка, необходимо более тщательное исследование, аналогичное проведенному для уравнения Шредингера, когда в нем также изменяется множитель при производной высшего порядка, а именно эффективная масса носителей тока [2,3].

Рассмотрим случай контакта по плоской границе двух узкощелевых полупроводников, каждый из которых описывается соответствующим уравнением Дирака [1]

$$E\psi(r) = \hat{H}\psi(r),$$

$$\hat{H} = \hat{\alpha}^i v_i^{\pm j}\hat{p}_j + \hat{\beta}\Delta^\pm + G^\pm. \quad (1)$$

Здесь $\hat{\alpha}^i$, $\hat{\beta}$ — матрицы Дирака, $\hat{p}_j$ — оператор импульса, $\psi(r)$ — четырехкомпонентные функции, $\Delta^\pm$, $G^\pm$, $v^\pm$ — соответственно полуширины энергетических щелей, работы выхода и скорости межзонных переходов для первого $(+)$ и второго $(-)$ полупроводников. Мы предполагаем при этом, что блоховские функции в обоих полупроводниках одинаковы. Случай несовпадающих блоховских функций обсужден в работе [4]. Отметим, что в отличие от уравнения Шредингера для огибающих в уравнении Дирака могут возникать приграничные (интерфейсные) состояния [5]. Это указывает, по-видимому, на возможность адекватного описания узкощелевых гетероструктур при помощи приближения огибающих функций. Наличие индексов у v_i^j связано с возможной анизотропией скорости межзонных переходов. У полупроводников A^4B^6 эта анизотропия осевая [1], и поэтому мы ограничимся этим случаем. Тогда

$$v_i^j = v_\parallel l_i l^j + v_\perp(\delta_i^j - l_i l^j), \quad (2)$$

где l^k — компоненты единичного вектора вдоль оси анизотропии, а $v_\parallel$ и $v_\perp$ — кейновские матричные элементы вдоль этой оси и перпендикулярно ей соответственно. Эти матричные элементы связаны с эффективными массами электронов и дырок, которые в модели Дирака равны, соотношениями $m_\parallel = \frac{\Delta}{v_\parallel^2}$, $m_\perp = \frac{\Delta}{v_\perp^2}$. Решая задачу, мы предполагаем, что граница представляет собой некий переходный слой, который имеет достаточно малую толщину $2a$ и внутри которого изменяются все параметры, отличающие один полупроводник от другого. Мы предполагаем также, что эти параметры меняются достаточно гладко внутри слоя от значений $v_\parallel^-$, $v_\perp^-$, Δ^-, G^- при $z = -a$ по одну сторону переходного слоя до $v_\parallel^+$, $v_\perp^+$, Δ^+, G^+ при $z = a$ по другую сторону. Теперь можно записать уравнение, описывающее свободные электроны и дырки во всей структуре, заменив Δ, G и v_i^j в (1) на функции $\Delta(z)$, $G(z)$ и $v_i^j(z)$:

$$\Delta(z) = \Delta^-, \quad G(z) = G^-, \quad v_i^j(z) = v_i^{j-}, \quad z \leqslant -a,$$

$$\Delta(z) = \Delta^+, \quad G(z) = G^+, \quad v_i^j(z) = v_i^{j+}, \quad z \geqslant a. \quad (3)$$

Ось z выбрана перпендикулярно слоям гетероструктуры. Отметим, что в настоящей работе описывается более общий случай узкощелевых гетероструктур, чем рассмотренный в обзоре [1], потому что мы допускаем изменение матричных элементов скорости v_i^j (примеры таких систем приведены в [6]). Поэтому необходимо видоизменить кинетическое слагаемое в (1), записанное для случая постоянных v_i^j, так, чтобы гамильтониан оставался эрмитовым. В результате получим

$$\hat{H} = 1/2\big(\hat{\alpha}^i v_i^j(z)\hat{p}_j + \hat{\alpha}^i\hat{p}_j v_i^j(z)\big) + \hat{\beta}\Delta(z) + G(z). \quad (4)$$

Чтобы получить граничные условия, необходимо установить, как связаны между собой функции $\psi(x, y, a)$ и $\psi(x, y, -a)$ при $a \to 0$, т.е. при a малых вплоть до атомных расстояний. Учитывая симметрию уравнения (4) относительно поперечных трансляций, легко интегрировать его по x и y, заменив тем самым операторы

$(\hat{p}_x, \hat{p}_y)$ на квантовые числа (q_x, q_y). Далее при интегрировании (4) по z на отрезке $[-a, a]$ мы, воспользовавшись малостью a, пренебрегаем частью слагаемых

$$\hat{\alpha}^i v_i^j(z) n_j \frac{\partial \psi(z)}{\partial z} + 1/2 \hat{\alpha}^i \frac{\partial v_i^j(z)}{\partial z} n_j \psi(z) = 0. \qquad (5)$$

Здесь и далее $\mathbf{n} = (0, 0, 1)$ — единичный вектор вдоль оси z, а $\hbar = 1$. Отметим, что из этого уравнения следует непрерывность нормальной компоненты тока, что является обязательным условием на границе раздела. Уравнение (5) легко решается на отрезке $[-a, a]$ после умножения его слева на $\alpha^i v_i^j(z) n_j$. После интегрирования (5) получаем следующие граничные условия:

$$\sqrt{\tilde{v}^+}\psi^+ = \sqrt{\tilde{v}^-} \exp\left\{-i\,\frac{\theta}{2}\,\hat{\Sigma}_y\right\} \psi^{(-)}. \qquad (6)$$

Здесь $1/2\hat{\mathbf{\Sigma}} = 1/2 \begin{pmatrix} \hat{\boldsymbol{\sigma}} & 0 \\ 0 & \hat{\boldsymbol{\sigma}} \end{pmatrix}$ — оператор спина, $\boldsymbol{\sigma}$ — матрицы Паули,

$$\tilde{v}^{\pm} = \sqrt{v_{\parallel}^{\pm 2} \cos^2\phi + v_{\perp}^{\pm 2} \sin^2\phi},$$

$$\theta = \operatorname{arctg}\left(\frac{v_{\perp}^{+}}{v_{\parallel}^{+}} \operatorname{tg}\phi\right) - \operatorname{arctg}\left(\frac{v_{\perp}^{-}}{v_{\parallel}^{-}} \operatorname{tg}\phi\right),$$

ϕ — угол между $\mathbf{n}$ и $\mathbf{l}$, ось y выбрана ортогональной плоскости $(\mathbf{n}, \mathbf{l})$ и совпадает с осью вращения от $\mathbf{n}$ к $\mathbf{l}$, $\exp\{-i\frac{\theta}{2}\hat{\Sigma}_y\}$ — оператор поворота на угол θ вокруг оси y, $\psi^{(+)} = \psi(a)$, а $\psi^{(-)} = \psi(-a)$. В изотропном случае θ обращается в нуль, и граничные условия переходят в более простые

$$\sqrt{\tilde{v}^+}\tilde{\psi}^{(+)} = \sqrt{\tilde{v}^-}\tilde{\psi}^{(-)}. \qquad (7)$$

В работе [6] было показано, что граничные условия (7) не влияют (по сравнению с обычными граничными условиями, согласно которым непрерывна волновая функция [7]) на определение энергетического спектра в задачах с различными квантовыми ямами, а также на амплитуду рассеяния от плоской границы. Однако граничные условия (6) и (7) существенно изменяют такие характеристики, как плотность вероятности и спиновая плотность. В частности, для квантовой ямы, рассмотренной в работе [6], где Δ и G одинаковы для квантовой ямы и барьера, а изменяется только v, причем в квантовой яме v больше, чем в барьере, благодаря граничным условиям (7) локализация носителей в яме возрастает.

Мы рассмотрели также случай бикристалла, т. е. случай, когда на границе раздела происходит поворот кристалла на угол χ вокруг оси $\mathbf{n}$, при этом $v_{\parallel}^{+} = v_{\parallel}^{-} = v_{\parallel}$, $v_{\perp}^{+} = v_{\perp}^{-} = v_{\perp}$. Интегрируя (5) при тех же предположениях, что и прежде, получаем следующие граничные условия:

$$\psi^{(+)} = \exp\left\{-i\,\frac{\mathbf{X}}{2}\,\hat{\mathbf{\Sigma}}\right\} \psi^{(-)}. \qquad (8)$$

Здесь

$$\mathbf{X} = \frac{(v_{\parallel} - v_{\perp})(v_{\parallel}\cos^2\phi - v_{\perp}\sin^2\phi)}{v^2} \times \sqrt{\frac{1 - (\mathbf{a}^-, \mathbf{a}^+)}{1 + (\mathbf{a}^-, \mathbf{a}^+)}}\,\frac{\sin(2\phi)}{2}(\mathbf{a}^- + \mathbf{a}^+) - \frac{(v_{\parallel} - v_{\perp})^2}{v^2}\,\frac{\sin^2(2\phi)}{4}\chi\mathbf{n},$$

$\mathbf{a}^{\pm} = \frac{\mathbf{l}^{\pm} - (\mathbf{l}^{\pm}, \mathbf{n})\mathbf{n}}{\sqrt{1 - (\mathbf{l}^{\pm}, \mathbf{n})^2}}$, $\mathbf{l}^{\pm}$ — единичные векторы вдоль оси анизотропии по обе стороны границы, $\tilde{v} = \tilde{v}^+ = \tilde{v}^-$ в данном случае.

Для случая анизотропных гетероструктур необходимо также обобщить оператор спиральности [5,7]

$$\hat{P} = -\hat{\gamma}_z \frac{(\hat{\boldsymbol{\alpha}}, \mathbf{q}_{\perp})}{q_{\perp}} \equiv -\hat{\gamma}_0 \frac{(\hat{\mathbf{\Sigma}}, [\mathbf{n}, \mathbf{q}_{\perp}])}{q_{\perp}}. \qquad (9)$$

Здесь $\hat{\gamma}_0$ и $\hat{\gamma}_z$ — матрицы Дирака, а $\mathbf{q}_{\perp} = (q_x, q_y, 0)$. В изотропном случае этот оператор сохраняет свое значение при переходе через границу. В анизотропном случае ему соответствует оператор

$$\hat{P} = -\hat{\gamma}_0 \frac{\hat{\Sigma}^k v_m^i n^m v_l^j q_{\perp}^l \varepsilon_{ijk}}{|v_m^j n^m v_l^j q_{\perp}^l \varepsilon_{ijk}|}, \qquad (10)$$

который коммутирует с гамильтонианом (4).

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проекты 96-02-16701 и 97-02-16346) и Миннауки (проект 97-1087 "Наноструктура").

Список литературы

[1] Б.А. Волков, Б.Г. Идлис, М.Ш. Усманов. УФН **165**, 799 (1995).
[2] G. Bastard. Phys. Rev. **B25**, 7584 (1982).
[3] A. Sasaki. Phys. Rev. **B30**, 7016 (1984).
[4] С.Г. Тиходеев. Письма в ЖЭТФ **53**, 162 (1991).
[5] Б.Г. Идлис, М.М. Усманов. ФТП **26**, *2*, 329 (1992).
[6] А.В. Колесников, А.П. Силин. ЖЭТФ **109**, 2125 (1996).
[7] А.И. Ахиезер, В.Б. Берестецкий. Квантовая электродинамика. Наука, М. (1969). §10.