ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ ДЛЯ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ МОДЕЛИ КЕЙНА И СПИН-ОРБИТАЛЬНОЕ СМЕШИВАНИЕ НА ГЕТЕРОГРАНИЦЕ

М.В.Кисин

Институт радиотехники и электроники Российской академии наук,
410019, Саратов, Россия
(Получена 12 апреля 1994 г. Принята к печати 18 апреля 1994 г.)

Найден канонический вид матрицы феноменологических граничных условий для волновой функции модели Кейна на резкой гетерогранице. Матрица граничных условий существенно не диагональна и характеризуется двумя независимыми параметрами, один из которых формируется спин-орбитальным взаимодействием на гетерогранице. Показано, что спин-орбитальное взаимодействие приводит к межзонному смешиванию огибающих валентной зоны и зоны проводимости, а в однозонном пределе — к спиновому смешиванию состояний продольного и поперечного движений, причем величина этого смешивания не является релятивистски малой.

Введение

Модель Кейна описывает kp-взаимодействие двух ближайших по энергии групп состояний противоположной четности (базисные состояния s- и p-типа) [1]. Эффективная волновая функция Ψ квазичастицы-носителя заряда в таком блоховском базисе содержит скалярную U и векторную $\mathbf{V}$ компоненты. С учетом спина они представляют собой соответственно четный и три нечетных спинора. Граничные условия (ГУ) для такого многокомпонентного объекта нетривиальны и должны по крайней мере на феноменологическом уровне отражать микроструктуру границы. При этом ГУ не могут быть получены так, как это делается, например, в теории Максвелла — интегрированием полевых уравнений через границу раздела, поскольку уравнения эффективной массы не справедливы на самой гетерогранице или в каком-либо гипотетическом переходном слое, т.е. процедура интегрирования не является корректной. По разные стороны гетерограницы (A и B) объекты сшивания Ψ_A и Ψ_B подчиняются эффективным уравнениям Шредингера с разными зонными параметрами, а в более общем случае — и с разной матричной структурой гамильтониана. Попытка вывести ГУ, исходя из микроскопического анализа поведения волновой функции на гетерогранице, вряд ли имеет преимущество перед чисто феноменологическим подходом, так как нарушение трансляционной инвариантности вблизи гетерограницы слишком усложняет задачу, делая ее фактически многочастичной. При этом на гетерогранице из рассмотрения исчезает сам объект сшивания — эффективная волновая функция квазичастицы. Наоборот, при последовательно феноменологическом описании резкая гетерограница (плоскость) не вносит в рассматриваемую систему никаких дополнительных пространственных масштабов, тем самым делая осмысленной задачу нахождения матрицы ГУ для макроскопической огибающей:

$$\Psi_A(z=-0) = \hat{\Gamma}_{AB}\Psi_B(z=+0). \tag{1}$$

Как было показано в работе [2], каноническим базисом для определения матрицы $\hat{\Gamma}_{AB}$ является базис блоховских функций вида

$$\left\{\begin{matrix} \xi_n^{(+1)} \\ \xi_n^{(-1)} \end{matrix}\right\}_{A,B} = \left\{\begin{matrix} S\alpha; & Z\alpha; & \frac{(X+iY)\beta}{\sqrt{2}}; & \frac{(X+iY)\alpha}{\sqrt{2}} \\ S\beta; & Z\beta; & -\frac{(X-iY)\alpha}{\sqrt{2}}; & \frac{(X-iY)\beta}{\sqrt{2}} \end{matrix}\right\}_{A,B}, \tag{2}$$

состоящий из четырех ($n = 1 \div 4$) пар крамерсово-сопряженных ($\nu = \pm 1$) базисных состояний одинаковой четности, реализующих базисы неприводимых представлений группы вращений вокруг оси z для спинов $1/2$ ($n = 1 \div 3$) и $3/2$ ($n = 4$). Ось квантования спина выбрана нами совпадающей с осью симметрии гетероструктуры. Аналогично матрицам материальных тензоров [3], матрица ГУ при этом разбивается на блоки $\hat{\Gamma}_{nm}$ размерности $2{\times}2$, связывающие только те компоненты функций $(\Psi_A)_n$ и $(\Psi_B)_m$, которые преобразуются по эквивалентным представлениям группы симметрии гетероструктуры. Это означает, что $\Gamma_{n4} = \Gamma_{4n} = 0$. Кроме того, постулированная нами локальная связь (1) добавляет условие инвариантности матрицы $\hat{\Gamma}_{AB}$ относительно отражения в плоскости гетерограницы [2]. Отсюда следует, что $\Gamma_{n1} = \Gamma_{1n} = 0$. В результате

$$\hat{\Gamma}_{AB} = \begin{vmatrix} \hat{\Gamma}_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \hat{\Gamma}_{22} & \hat{\Gamma}_{23} & 0 \\ 0 & \hat{\Gamma}_{32} & \hat{\Gamma}_{33} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \hat{\Gamma}_{44} \end{vmatrix}. \tag{3}$$

В модели с изотропным спектром матрица ГУ должна сохранять свой вид при вращениях и отражениях системы координат относительно оси z, а также при обращении времени. Указанные операции симметрии не смешивают между собой канонические базисные дублеты (2), полностью определяя при этом внутреннюю (по верхнему индексу ν) структуру субматриц $\hat{\Gamma}_{nn'}^{\nu\nu'}$ в (3): в выбранном базисе субматрицы диагональны и действительны, т.е. их можно считать просто числами: $\hat{\Gamma}_{11} = \Gamma_{11}\delta_{\nu\nu'}$ и т.д.

В данной работе мы покажем, что все оставшиеся элементы (3) связаны друг с другом фундаментальными для модели Кейна связями и могут быть выражены через два независимых параметра, характеризующих саму гетерограницу и имеющих ясный физический смысл.

1. Основные соотношения модели

Пренебрегая влиянием удаленных зон, напишем гамильтониан модели Кейна в виде

$$\hat{H} = E_g\hat{B}_1 + (\hat{\mathbf{k}}\hat{\mathbf{P}}) + \hat{H}_{so},$$

$$\hat{H}_{so} = \frac{\Delta}{3}(\hat{\sigma}\hat{\mathbf{J}} - 1)\hat{B}_3, \qquad \mathbf{k} = -\mathbf{i}\hbar\nabla, \tag{4}$$

где $\hat{B}_1$ и $\hat{B}_3$ — единичные матрицы в подпространствах U- и $\mathbf{V}$-компонент волновой функции Ψ; $\hat{\mathbf{P}} = P\hat{\mathbf{a}}$ — межзонные матрицы оператора скорости, связывающие эти подпространства; $P = \langle S|\frac{\hat{k}_z}{m}|Z\rangle$ — величина межзонного матричного элемента скорости; $\hat{\mathbf{a}}$ — матричная структура соответствующего оператора, которую мы полагаем общей для полупроводников гетеропары. Оператор $\hat{\mathbf{P}}$ формирует дисперсию квазичастиц в модели Кейна, а также в соответствии с уравнением непрерывности определяет поток волновой функции

$$\hat{\mathbf{P}} = \frac{\partial\hat{H}}{\partial\mathbf{k}}; \qquad \frac{\partial}{\partial t}(\Psi^+\Psi) = -\operatorname{div}(\Psi^+\hat{\mathbf{P}}\Psi). \tag{5}$$

Спин вводится в гамильтониан модели Кейна с помощью оператора спин-орбитального расщепления базисных $\mathbf{V}$-состояний $\hat{H}_{so}$. Здесь $\hat{\boldsymbol{\sigma}}$ — оператор спина, $\hat{\mathbf{J}}$ — оператор «орбитального» момента 1, имеющий в базисе $\{X, Y, Z\}$ матричное представление

$$\hat{J}_x = \begin{vmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{vmatrix}, \quad \hat{J}_y = \begin{vmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{vmatrix}, \quad \hat{J}_z = \begin{vmatrix} 0 & -i & 0 \\ -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{vmatrix} \tag{6}$$

Наш выбор оператора спин-орбитального расщепления позволяет вести отсчет энергии квазичастицы E от потолка валентной зоны. Действительно, из известного равенства

$$(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{a})(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\mathbf{b}) = (\mathbf{ab}) + \mathbf{i}\hat{\boldsymbol{\sigma}}[\mathbf{a}\times\mathbf{b}]$$

следует

$$(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\hat{\mathbf{J}})^2 = \hat{\mathbf{J}}^2 - (\hat{\boldsymbol{\sigma}}\hat{\mathbf{J}}) = 2 - (\hat{\boldsymbol{\sigma}}\hat{\mathbf{J}}),$$

откуда нетрудно получить собственные значения оператора $(\hat{\boldsymbol{\sigma}}\hat{\mathbf{J}})$, равные $\lambda_1 = -2$ и $\lambda_2 = 1$. Поскольку матрицы $\hat{J}_i$ бесшпуровые, второе собственное значение должно быть двойным (с учетом спина — четырехкратным), и, следовательно, оператор $\hat{H}_{so}$ в (4), расщепляя базисные $\mathbf{V}$-состояния на величину Δ, сохраняет отсчет энергии от потолка четырехкратно вырожденной дырочной зоны. При этом $\hat{H}_{so}$ допускает очевидное спектральное разложение:

$$\hat{H}_{so} = -\Delta \hat{C}_s + O\hat{C}_{lh},$$

$$\hat{C}_s = \frac{1 - (\hat{\boldsymbol{\sigma}}\hat{\mathbf{J}})}{3}, \qquad \hat{C}_{lh} = \frac{2 + (\hat{\boldsymbol{\sigma}}\hat{\mathbf{J}})}{3}, \tag{7}$$

где $\hat{C}_s$ и $\hat{C}_{lh}$ — проекторы на базисные состояния двукратно вырожденной (s — спин-отщепленные дырки) и четырехкратно вырожденной (lh — легкие и тяжелые дырки) зон.

Для дальнейшего анализа нам необходимо определить связь между компонентами волновой функции квазичастицы в модели Кейна. Проще всего это сделать в базисе

$$\{\xi_n^\nu\}_0 = \{S, X, Y, Z\} \otimes \begin{Bmatrix} \alpha \\ \beta \end{Bmatrix}, \tag{8}$$

в котором соответствующее уравнение Шредингера приводится к виду

$$\begin{cases} E_g U + P(\mathbf{k}\mathbf{V}_0) = EU, & \text{(9а)} \\ P(\mathbf{k}U) + \hat{H}_{so}\mathbf{V}_0 = E\mathbf{V}_0. & \text{(9б)} \end{cases}$$

С помощью проекционных операторов (7) векторную часть решения $\mathbf{V}_0$ можно представить в виде

$$\mathbf{V} = P \sum_{i=s,lh} \alpha_i \hat{C}_i(\hat{\mathbf{k}}U).$$

Подставив последнее выражение в (9б), найдем коэффициенты разложения α_i. В результате получим

$$\mathbf{V}_0 = \left(\frac{\hat{C}_{lh}}{E} + \frac{\hat{C}_s}{E+\Delta}\right) P(\hat{\mathbf{k}}U) = \left[(1-\delta)\hat{\mathbf{k}} + i\delta\hat{\mathcal{K}}\right] \frac{PU}{E},$$

$$\hat{\mathcal{K}} = [\hat{\boldsymbol{\sigma}} \times \hat{\mathbf{k}}], \qquad \delta = \frac{1}{3}\Delta/(E+\Delta). \tag{10}$$

Переход от базиса (8) к каноническому базису (2) осуществляется с помощью унитарного преобразования $\hat{R}$:

$$\hat{R} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} 0 & 0 & \sqrt{2} \\ i\sigma_y & -i\sigma_x & 0 \\ 1 & -i\sigma_z & 0 \end{vmatrix}, \quad \mathbf{V} = \hat{R}\mathbf{V}_0 = \begin{pmatrix} V_{oz}, \\ -\varepsilon\left(\frac{3}{2\Delta} i\hat{\mathcal{K}}_z PU + V_{oz}\right), \\ \left(\hat{k}_x - i\sigma_z\hat{k}_y\right)\frac{PU}{\sqrt{2}E}. \end{pmatrix} \tag{11}$$

Здесь введено обозначение $\varepsilon = \frac{\sqrt{2}}{3}\frac{\Delta}{E+\frac{2}{3}\Delta}$, а величина V_{oz} определяется соотношением (10).

2. Связи между параметрами ГУ

Потребуем, во-первых, чтобы ГУ (3) сохраняли поток волновой функции через границу. Непрерывность z-компоненты потока сводится к непрерывности формы $P\ (UV_{oz}^{+} + U^{+}V_{oz})$, поскольку в выбранном нами базисе (2) матрица $\hat{\mathbf{a}}_z$ имеет только две единичные ненулевые субматрицы $(a_z)_{12} = (a_z)_{21} = 1$, связывающие спиноры Ψ_1 и Ψ_2 (в нашем каноническом базисе это спиноры U и V_{oz}). В результате получим

$$P_A\Gamma_{11}\left[\Gamma_{22}\left(\Psi_1^{+}\Psi_2+\Psi_1\Psi_2^{+}\right)_B+\Gamma_{23}\left(\Psi_1^{+}\Psi_3+\Psi_1\Psi_3^{+}\right)_B\right]=P_B\left(\Psi_1^{+}\Psi_2+\Psi_1\Psi_2^{+}\right)_B. \tag{12}$$

Поскольку компоненты импульса частицы вдоль границы раздела k_x и k_y являются хорошими квантовыми числами, без потери общности спинор U можно считать собственным вектором эрмитова оператора $\hat{\mathcal{K}}_z$:

$$\hat{\mathcal{K}}_z U = \mu K U, \qquad K = \sqrt{k_x^2 + k_y^2}, \qquad \mu = \pm 1. \tag{13}$$

Нетрудно видеть, что члены с $\hat{\mathcal{K}}_z$, входящие в векторную часть волновой функци $\mathbf{V}$, не дают вклада в среднеее значение потока, поэтому, подставляя в (12) выражение для Ψ_3 из (11), находим первую связь между параметрами ГУ:

$$\Gamma_{22} - \varepsilon_B\Gamma_{23} = \frac{P_B}{P_A\Gamma_{11}}. \tag{14}$$

Отметим, что использованное в работе [2] требование инвариантности вида матрицы оператора потока является слишком жестким и приводит к необоснованному занулению недиагонального элемента Γ_{23} канонической матрицы ГУ (3).

Для определения дальнейших связей между элементами матрицы ГУ снова воспользуемся соотношениями (11) для компонент кейновских волновых функций. Потребуем, чтобы они оставались справедливыми для компонент функций Ψ_A и Ψ_B и после их сшивания на гетерогранице. Рассмотрим условия сшивания для компонент Ψ_2 и Ψ_3 (первые две компоненты вектора $\mathbf{V}$):

$$V_{oz}^{(A)} = \Gamma_{22}V_{oz}^{(B)} - \Gamma_{23}\varepsilon_B\left(V_{oz}^{(B)} + \frac{3}{2\Delta_B}i\hat{\mathcal{K}}_z P_B U^{(B)}\right),$$

$$-\varepsilon_A\left(\frac{3}{2\Delta_A}i\hat{\mathcal{K}}_z P_A U^{(A)}+V_{oz}^{(A)}\right)=\Gamma_{32}V_{oz}^{(B)}-\Gamma_{33}\varepsilon_B\left(\frac{3}{2\Delta_B}i\hat{\mathcal{K}}_z P_B U^{(B)}+V_{oz}^{(B)}\right).$$

Спиноры $U^{(B)}$ и $V_{oz}^{(B)}$ мы можем считать независимыми, поэтому, исключая из последних соотношений $V_{0z}^{(A)}$ и выражая $U^{(A)}$ через $U^{(B)}$, получим связи

$$\Gamma_{33} = \Gamma_{11}\frac{P_A}{P_B}\cdot\frac{\left(E_B + \frac{2}{3}\Delta_B\right)}{\left(E_A + \frac{2}{3}\Delta_A\right)} - \varepsilon_A\Gamma_{23}, \tag{15}$$

$$\Gamma_{32} = \varepsilon_B \Gamma_{33} - \varepsilon_A \frac{P_B}{P_A \Gamma_{11}}, \tag{16}$$

где в соответствии с выбором начала отсчета энергии в полупроводниках A и B имеем $E_A - E_B = \Delta_V$ — скачок потолка валентной зоны на гетерогранице. Наконец, из условий сшивания для Ψ_4 с учетом сохранения k_x и k_y непосредственно получаем последнюю оставшуюся связь

$$\frac{\Gamma_{44} P_B}{E_B} = \frac{\Gamma_{11} P_A}{E_A}. \tag{17}$$

Соотношения (14)–(17) решают поставленную задачу, выражая все элементы матрицы ГУ через Γ_{11} и Γ_{23}. Наш выбор независимых параметров при этом не случаен. Так, бездисперсная (не зависящая от энергии) величина Γ_{11} является, очевидно, наиболее естественным независимым параметром ГУ, определяющим характер сшивки пространственных частей базисных функций (2). Второй независимый параметр должен, по-видимому, формироваться спин-орбитальным взаимодействием на гетерогранице. Нетрудно видеть, что Γ_{32} не является подходящим параметром, поскольку определяется в основном спин-орбитальным взаимодействием в объеме полупроводников, а не на границе. Действительно, из (16) следует, что если в объеме контактирующих полупроводников спин-орбитальное взаимодействие отсутствует, т.е. $\hat{H}_{so}^{(A,B)} = 0$ ($\Delta_{A,B} = 0$ и $\varepsilon_{A,B} = 0$), то и $\Gamma_{32} = 0$. Более того, если при этих условиях $\Gamma_{32} \neq 0$, то приведенное выше условие сшивания компонент Ψ_3 предопределит нам линейную зависимость спиноров $U^{(B)}$ и $V_{oz}^{(B)}$, т.е. фактически задаст связь $U^{(B)}$ и $\frac{\partial U^{(B)}}{\partial z}$ на гетерогранице. Условие сшивания компонент Ψ_2 в этом плане является непротиворечивым, т.е. даже при $\hat{H}_{so}^{(A,B)} = 0$ межзонное смешивание, осуществляемое параметром Γ_{23}, может быть интерпретировано как результат спин-орбитального взаимодействия на самой гетерогранице.

Дисперсия параметров ГУ (3), вытекающая из соотношений (14)–(17), является в действительности следствием взаимной зависимости компонент волновой функции Ψ в модели Кейна. Для рассматриваемой модели 1 порядка реально независимыми мы можем считать лишь два спинора из четырех, причем, как видно из (11), в нашей геометрии задачи и при выборе базиса в качестве независимых компонент Ψ следует взять компоненты Ψ_1 и Ψ_2, т.е. спиноры U и V_z. При переходе к эффективному уравнению 2 порядка, например, для U это соответствует возможности независимого выбора U и $\frac{\partial U}{\partial z}$ на гетерогранице. Нас должны в первую очередь интересовать эффективные граничные условия для независимых компонент. Прежде чем записать эти соотношения в замкнутой форме, сделаем наши ГУ более симметричными, выделив в явном виде дисперсию недиагональных элементов. Обращая матрицу $\hat{\Gamma}_{AB}$, нетрудно получить

$$\Gamma_{11}^{(BA)} = \frac{1}{\Gamma_{11}^{(AB)}}, \qquad \Gamma_{23}^{(BA)} = -\Gamma_{23}^{(AB)} \frac{\left(E_A + \frac{2}{3}\Delta_A\right)}{\left(E_B + \frac{2}{3}\Delta_B\right)}.$$

Естественно теперь ввести величину

$$\Gamma_{23}^{(AB)}\left(E_A+\frac{2}{3}\Delta_A\right)=-\Gamma_{23}^{(BA)}\left(E_B+\frac{2}{3}\Delta_B\right)=\gamma\Delta_{AB},$$

где константа Δ_{AB} имеет размерность энергии и характеризует силу спин-орбитального взаимодействия на гетерогранице, а параметр межзонного смешивания γ при обращении ГУ меняет знак $\gamma_{AB}=-\gamma_{BA}$. Поскольку дисперсия элементов матрицы $\hat{\Gamma}_{AB}$ в основном обусловлена взаимной зависимостью компонент кейновской волновой функции в объеме полупроводника, можно ожидать, что дисперсия величины γ будет минимальна, т.е. сопоставима с дисперсией основного параметра Γ_{11} (далее будем обозначать его просто Γ).

Подставив введенные величины в условие сшивания компонент Ψ_2 и учитывая (14), находим окончательно

$$\begin{cases} U^{(A)}=\Gamma U^{(B)} & \text{(18а)}\\ P_AV_z^{(A)}=\dfrac{1}{\Gamma}P_BV_z^{(B)}-\dfrac{i\hat{K}_zU_B}{\sqrt{2}}\cdot\dfrac{\gamma\Delta_{AB}P_AP_B}{\left(E_A+\frac{2}{3}\Delta_A\right)\left(E_B+\frac{2}{3}\Delta_B\right)}. & \text{(18б)}\end{cases}$$

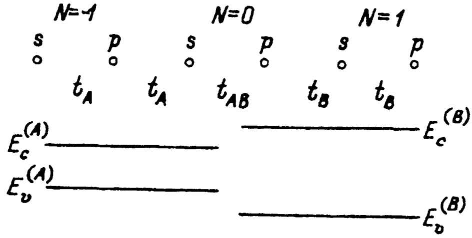
В отсутствие спин-орбитального взаимодействия граничные условия описываются единственным «скалярным» параметром Γ, причем, как следует из (14)–(17), он полностью определяет ГУ как для скалярной, так и для векторной частей волновой функции. Матрица ГУ в этом случае не содержит недиагональных элементов, т.е. на гетерогранице отсутствует межзонное смешивание огибающих зоны проводимости и валентной зоны. При наличие спин-орбитального взаимодействия ГУ (18) демонстрируют возможность межзонного смешивания на гетеропереходе. Заметим, что для атомарно-резких гетерограниц параметр Δ_{AB} может быть сравним по величине с параметрами Δ_A и Δ_B.

3. Анализ результатов

Введенный выше параметр межзонного смешивания Γ_{23} допускает наглядную интерпретацию в рамках метода сильной связи. Рассмотрим простейшую модель, представив кристалл как цепочку атомов, имеющих поочередно либо s- либо p-орбитали вида (2). В объеме полупроводника огибающая волновой функции легкой частицы эквивалентна столбцу амплитуд для базисных состояний спина 1/2

$$\Phi_{A,B}=\begin{pmatrix}\phi_S(N)\\ \phi_Z(N)\\ \phi_{XY}(N)\end{pmatrix}_{A,B},$$

соответствующих первым трем орбиталям из (2). Четвертое базисное состояние с полным спином 3/2 в одномерной модели отщепляется, формируя независимую зону тяжелых дырок. Индексом N будем нумеровать слои, содержащие каждый по два атома с орбиталями



Пояснение в тексте.

разной симметрии. Перекрытие S- и Z-орбиталей соседних атомов и спин-орбитальное взаимодействие на p-орбиталях данного атома приводят к следующей связи амплитуд с одинаковым спиновым числом ν (далее индекс ν опускаем):

$$\begin{cases} (E - E_g)\phi_S(N) = t_{N-1,N}\phi_Z(N-1) - t_{N,N}\phi_Z(N), \\ \left(E + \frac{\Delta}{3}\right)\phi_Z(N) + \frac{\sqrt{2}}{3}\Delta\phi_{XY}(N) = -t_{N,N}\phi_S(N) + t_{N,N+1}\phi_S(N+1), \\ \frac{\sqrt{2}}{3}\Delta\phi_Z(N) + \left(E + \frac{2}{3}\Delta\right)\phi_{XY}(N) = 0. \end{cases} \tag{19}$$

Для интегралов перекрытия положим $t_{-1,0} = t_{-1,-1} = \ldots = t_A$ и $t_{0,1} = t_{1,1} = \ldots = t_B$. На границе возьмем $t_{0,0} = t_{AB}$ и, кроме того, введем спин-орбитальное смешивание s- и p-орбиталей, отсутствующее в объеме полупроводников и соответствующее спин-орбитальному взаимодействию на нецентросимметричном потенциале гетерограницы вида

$$\hat{h}_{so} \sim \mathbf{n_z}[\hat{\boldsymbol{\sigma}} \times \hat{\mathbf{k}}] \sim \mathbf{n_z}\hat{\mathcal{K}}_\mathbf{z}$$

($\mathbf{n}_z$ —нормаль к границе). Нетрудно убедиться, что этот оператор смешивает только амплитуды ϕ_S и ϕ_{XY}, причем его матричный элемент h между соответствующими базисными орбиталями имеет как раз описанную выше структуру $h \sim \gamma\Delta_{AB}$ в пограничном слое ($N = 0$) имеем соотношения

$$\begin{cases} (E_A - E_{gA})\phi_S(0) = t_A\phi_Z(-1) - t_{AB}\phi_Z(0) + h\phi_{XY}(0), \\ \left(E_B + \frac{\Delta_B}{3}\right)\phi_Z(0) + \frac{\sqrt{2}}{3}\Delta_B\phi_{XY}(0) = -t_{AB}\phi_S(0) + t_B\phi_S(1), \\ \frac{\sqrt{2}}{3}\Delta_B\phi_Z(0) + \left(E_B + \frac{2}{3}\Delta_B\right)\phi_{XY}(0) = -h\phi_S(0). \end{cases} \tag{20}$$

Для упрощения задачи мы пренебрегли изменением энергии базисных состояний вплоть до самой границы (см. рисунок). Амплитуда $\phi_S(0)$ входит также в систему соотношений (19) для полупроводника A при $N = -1$. Через нее мы можем доопределить в слое $N = 0$ огибающую $\tilde{\Phi}_A(0)$, все остальные компоненты которой связаны с $\phi_S(0)$ так же, как в объеме полупроводника A. Аналогично через величину $\phi_Z(0)$ и систему (19) для полупроводника B мы можем доопределить в слое $N = 0$ «объемную» огибающую $\tilde{\Phi}_B(0)$. Исключая затем амплитуды с $N = \pm 1$, находим связи между компонентами огибающих $\tilde{\Phi}_A$ и $\tilde{\Phi}_B$ в слое $N = 0$:

$$\begin{cases} t_B\tilde{\phi}_S^{(B)} - t_{AB}\tilde{\phi}_S^{(A)} = \frac{\sqrt{2}}{3}\Delta_B\left(\phi_{XY} - \tilde{\phi}_{XY}^{(B)}\right), \\ t_A\tilde{\phi}_Z^{(A)} - t_{AB}\tilde{\phi}_Z^{(B)} = -h\phi_{XY}, \\ \left(E_B + \frac{2}{3}\Delta_B\right)\left(\phi_{XY} - \tilde{\phi}_{XY}^{(B)}\right) = -h\tilde{\phi}_S^{(A)}. \end{cases} \tag{21}$$

Если $h = 0$, то из (21) следует известный результат [4]

$$\Gamma_{11} = t_B/t_{AB}, \qquad \Gamma_{22} = t_{AB}/t_A. \tag{22}$$

Считая взаимодействие $\hat{h}$ слабым, нетрудно получить из (21) перенормировку Γ_{11} и интересующую нас связь

$$t_A\tilde{\phi}_Z^{(A)}(0) \simeq t_{AB}\tilde{\phi}_Z^{(B)}(0) - h\tilde{\phi}_{XY}^{(B)}(0), \tag{23}$$

которая аналогична полученным выше из соображений симметрии условиям сшивания величин V_z (компонент Ψ_2 кейновских огибающих). Видно, что $\Gamma_{23} \sim h$, т.е. межзонное смешивание действительно определяется спин-орбитальным взаимодействием на гетерогранице $\hat{h}_{so}$.

Рассмотренная простая модель имеет, конечно, чисто иллюстративное значение, поскольку в одномерном случае амплитуды $\phi_{XY}(N)$ однозначно определяются амплитудами $\phi_Z(N)$ и соотношение (23) может быть сведено просто к перенормировке параметра Γ_{22}. При наличии продольного движения, однако, амплитуда ϕ_{XY} будет связана также с амплитудой ϕ_S аналогично связям (11) между компонентами кейновской волновой функции Ψ_3 и Ψ_1, что и приведет к межзонному сшиванию типа (18б).

В заключение рассмотрим однозонный предел для найденных ГУ. В случае широкозонных электронных полупроводников с параболическим законом дисперсии часто бывает удобно пользоваться обычным уравнением Шредингера 2 порядка и граничными условиями для U и $\frac{\partial U}{\partial z}$. Подставим (10) в (9а). Учитывая, что $(\hat{\mathbf{k}}\hat{\mathcal{K}}) = 0$, получим дисперсионное уравнение модели Кейна и выражение для эффективной массы электрона проводимости на дне зоны:

$$(E - E_g) = (1 - \delta)\frac{P^2k^2}{E} \simeq \frac{k^2}{2m}.$$

Теперь из (18б) с помощью (10) нетрудно получить граничное условие для производной:

$$\frac{\hat{k}_zU_A}{m_A} = \frac{1}{\Gamma}\frac{\hat{k}_zU_B}{m_B} + 2i\hat{\mathcal{K}}_zU_B\left[\frac{1}{\Gamma}\frac{\delta_BP_B^2}{E_{gB}} - \Gamma\frac{\delta_AP_A^2}{E_{gA}} - \frac{\gamma\Delta_{AB}P_AP_B}{\sqrt{2}\left(E_{gA}+\frac{2}{3}\Delta_A\right)\left(E_{gB}+\frac{3}{2}\Delta_B\right)}\right]. \tag{24}$$

Как и следовало ожидать, вклад спин-орбитального взаимодействия в граничные условия не содержит релятивистской малости, определяясь в основном соотношением параметров $\Delta_{A,B}$ и Δ_{AB} с

$E_g^{(A,B)}$. В соответствии с (13) ГУ для производных (24) оказываются зависящими от спинового квантового числа μ и приводят к смешиванию продольного K и поперечного k_z импульсов даже в случае параболического спектра квазичастиц. Интересно отметить, что переход к параболическому спектру не приводит к модификации матрицы ГУ для явно рассматриваемых состояний, которые теперь описываются квадратичным по импульсу гамильтонианом. Условия сшивки для огибающих «удаленных» зон превращаются просто в дополнительные условия для производных. Можно ожидать поэтому, что учет высших зон в исходном гамильтониане (4) также не приведет к радикальным изменениям полученных ГУ, по крайней мере для энергий квазичастиц, не попадающих в зону тяжелых дырок.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (93-02-15480).

Список литературы

[1] E.O. Kane. J. Phys. Chem. Sol., **1**, 249 (1957).
[2] М.В. Кисин. ФТП, **27**, 488 (1993).
[3] Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках* (М., Наука, 1972).
[4] T. Ando, S. Wakahara, H. Akera. Phys. Rev. B, **40**, 11609 (1989).

Редактор В.В. Чалдышев