

МЕТОД ОГИБАЮЩИХ ФУНКЦИЙ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ В МИКРОСТРУКТУРАХ С ПЛАВНЫМ ИЗМЕНЕНИЕМ ПОТЕНЦИАЛА НА ГЕТЕРОГРАНИЦАХ

© Г.Ф.Караваев, И.Н.Криворотов

Сибирский физико-технический институт им. В.Д. Кузнецова,
634050 Томск, Россия
(Получена 11 января 1995 г. Принята к печати 15 мая 1995 г.)

На конкретных примерах сверхрешеток с плавными гетерограницами рассмотрен вид уравнений для огибающих функций в рамках точной формулировки метода огибающих М. Барта для описания электронного строения квантово-размерных микроструктур. При точном однозначном определении огибающих как плавных функций уравнения для них оказываются слишком сложными. Предложена более простая система уравнений для новых огибающих функций, которая обладает энергетическим спектром, полностью совпадающим со спектром исходной задачи, если решения для огибающих приводят к нетривиальным решениям исходной задачи.

1. Введение

Впервые метод огибающих функций для определения электронных состояний в полупроводниках был использован в работах [1], где получено уравнение для случая мелких примесных уровней, и [2] — для случая глубоких примесей. Впоследствии этот метод применялся во многих работах (например, [3–5]) и для исследования квантово-размерных структур. Однако точная формулировка метода была дана сравнительно недавно [6,7]. В работах [6,7] точный подход был проиллюстрирован на примере гетероструктуры с резким изменением потенциала на гетерогранице. При применении подобного подхода к реальным структурам возникает проблема выбора координаты резкой гетерограницы. От этого зависят получаемые результаты. Реальный потенциал, разумеется, остается непрерывным даже на гетерогранице. Поэтому актуальной оказывается задача применения точных соотношений метода огибающих [6,7] к микроструктурам с плавным изменением потенциала на гетерогранице.

Приведем основные результаты работ [6,7], необходимые нам в дальнейшем. Для простоты вычислений рассматривается одномерная

структура длины L , составленная из участков, отличающихся друг от друга химическим составом и потенциалом $V(z)$. Постоянная кристаллической решетки a считается одинаковой во всех участках структуры. На волновую функцию электрона $\Psi(z)$ в структуре накладываются периодические граничные условия, и она разыскивается в виде разложения

$$\Psi(z) = \sum_n F_n(z) U_n(z), \quad (1)$$

где $U_n(z)$ — полный набор периодических функций с периодом a , а огибающие функции $F_n(z)$ равны

$$F_n(z) = \sum_k F_n(k) e^{ikz} \quad (2)$$

и в разложении по плоским волнам содержат лишь члены с волновыми векторами k , лежащими в первой зоне Бриллюэна, что обеспечивает единственность разложения (1). Точные уравнения для $F_n(z)$ имеют вид

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 F_n}{dz^2} - \frac{i\hbar}{m} \sum_r p_{nr} \frac{dF_r}{dz} + \sum_r \int_L dz' H_{nr}(z, z') F_r(z') = E F_n(z). \quad (3)$$

Здесь обозначено

$$H_{nr}(z, z') = T_{nr} \delta(z - z') + V_{nr}(z, z'), \quad (4)$$

$$V_{nr}(z, z') = \frac{1}{L} \sum_k \sum_{k'} \sum_G \sum_{G'} U_{n, G+G_1}^* V_{G-G'}(k) U_{r, G'} e^{i(k_1 z - k' z')}, \quad (5)$$

G — вектор обратной решетки, $k+k' = k_1 + G_1$, причем вектор k_1 всегда находится в первой зоне Бриллюэна ($-\frac{\pi}{a} < k_1 < \frac{\pi}{a}$), $V_G(k)$ и $U_{n, G}$ — фурье-компоненты потенциала структуры $V(z)$ и базисной функции U_n ,

$$V_G(k) = \int_L \frac{dz}{L} V(z) e^{-i(k+G)z}, \quad (6)$$

$$U_{n, G} = \int_a \frac{dz}{a} U_n(z) e^{-iGz}. \quad (7)$$

Величины T_{nr} и p_{nr} есть матричные элементы операторов кинетической энергии и импульса, вычисленные в базисе функций $U_n(z)$, \hbar — постоянная Планка, m — масса свободного электрона, E — собственное значение энергии.

Потенциальный член $V_{nr}(z, z')$ представляется в форме

$$V_{nr}(z, z') = V_{nr}(z) \Delta(z - z') + V_{nr}^{(nl)}(z, z'), \quad (8)$$

где $V_{nr}(z)$ и $V_{nr}^{(nl)}$ — локальная и нелокальная его части соответственно. Они определяются формулами

$$V_{nr}(z) = \sum_k \sum_G \sum_{G'} U_{n, G}^* V_{G-G'}(k) U_{r, G'} e^{ikz}, \quad (9)$$

$$V_{nr}^{(nl)}(z, z') = \frac{1}{L} \sum_k \sum_{k'} \sum_G \sum_{G'} \left[U_{n, G+G'}^* e^{ik_1 z} - U_{n, G}^* e^{i(k+k')z} \right] \times \\ \times V_{G-G'}(k) U_{r, G'} e^{-ik' z'}, \quad (10)$$

$$\Delta(z - z') = \frac{1}{L} \sum_k e^{ik(z-z')}. \quad (11)$$

Доказано свойство $V_{nr}^{(nl)}(z, z')$:

$$\int_L dz' V_{nr}^{(nl)}(z, z') = 0, \quad (12)$$

что позволяет пренебречь вкладом нелокальной части $V_{nr}(z, z')$ в гамильтониан при анализе состояний, описываемых медленно изменяющимися функциями $F_n(z)$.

2. Уравнения для огибающих функций в случае плавной гетерограницы

Пусть структура длины L составлена из слоев M , отличающихся химическим составом. Тогда потенциал $V(z)$ представляется в виде

$$V(z) = V^{(0)}(z) + \delta V(z), \quad (13)$$

где $V^{(0)}(z)$ — потенциал в массивном полупроводнике одного из компонентов, а $\delta V(z)$ — добавка, соответствующая потенциалам других компонентов. В качестве $V^{(0)}(z)$ можно выбрать и другой потенциал, например в виде линейной комбинации потенциалов всех компонентов структуры. Предположим, что потенциал $\delta V(z)$ имеет следующий вид:

$$\delta V(z) = \sum_{l=1}^M \theta^l(z) \delta V^l(z), \quad (14)$$

где индекс l нумерует слои структуры, а $\delta V^l(z)$ есть разность потенциалов массивного полупроводника l -го компонента и $V^{(0)}(z)$, функция $\theta^l(z)$ близка к единице на l -м участке структуры и близка к нулю на остальных участках, а в области границ l -го участка изменяется от нуля до единицы.

Представим $\delta V^l(z)$ и $\theta^l(z)$ в виде рядов Фурье

$$\delta V^l(z) = \sum_G \delta V_G^l e^{iGz}, \quad (15)$$

$$\theta^l(z) = \sum_k \sum_{G''} \Phi^l(k + G'') e^{i(k+G'')z}, \quad (16)$$

где

$$\delta V_{G'}^l = \frac{1}{a} \int_a dz \delta V^l(z) e^{-iG'z}, \quad (17)$$

$$\Phi^l(k + G'') = \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{L/2} dz \theta^l(z) e^{-i(k+G'')z}. \quad (18)$$

Теперь можно записать поправку к потенциалу $\delta V(z)$ в следующем виде:

$$\delta V(z) = \sum_{l=1}^M \sum_k \sum_{G'} \sum_{G''} \delta V_{G'}^l \Phi^l(k + G'') e^{i(k+G'+G'')z}, \quad (19)$$

и фурье-образы потенциала при $k \neq 0$:

$$V_G(k) = \sum_{l=1}^M \sum_{G'} \delta V_{G'}^l \Phi^l(k + G - G') \quad (20)$$

и для случая $k = 0$:

$$V_G(0) = V_G^{(0)} + \sum_{l=1}^M \sum_{G'} \delta V_{G'}^l \Phi^l(G - G'). \quad (21)$$

Здесь для $k + G \neq 0$ можно записать

$$\Phi^l(k + G) = \int \frac{dz}{L} \frac{\Delta^l(z)}{i(k+G)} e^{-i(k+G)z}, \quad (22)$$

$$\Delta^l(z) = \frac{d\theta^l(z)}{dz}, \quad (23)$$

а для $k = G = 0$ имеем

$$\Phi^l(0) = \int \frac{dz}{L} \theta^l(z). \quad (24)$$

Потенциал $V_{nr}(z)$ можно представить в виде

$$V_{nr}(z) = V_{nr}^{(0)} + \sum_{l=1}^M \left\{ \delta V_{nr}^l \theta^l(z) + \sum_{G \neq 0} [\delta V_{nr}^l(G) - \delta V_{nr}^l e^{iGz}] \lambda^l(G, z) \right\}, \quad (25)$$

где

$$\lambda^l(G, z) = \sum_k \Phi^l(k + G) e^{ikz} = \frac{L}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk \Phi^l(k + G) e^{ikz}, \quad (26)$$

$$\delta V_{nr}^l(G) = \sum_{G'} \sum_{G''} U_{n,G'}^* U_{n,G''} \delta V_{G'-G''-G}^l, \quad \delta V_{nr}^l = \delta V_{nr}^l(0). \quad (27)$$

Отсюда следует, что в случае плавных гетерограниц, когда фурье-компоненты $\Phi^l(k + G'')$ при $G'' \neq 0$ пренебрежимо малы, в формуле (25) остаются лишь первые два члена.

Нелокальная часть потенциала принимает следующий вид:

$$\begin{aligned}
 V_{nr}^{(nl)}(z, z') &= \left[-e^{-i\pi(z-z')/a} / 2\pi i(z-z') \right] \times \\
 &\times \sum_{l=1}^M \sum_G \left[\delta V_{nr}^l \left(G - \frac{2\pi}{a} \right) e^{i2\pi z/a} - \delta V_{nr}^l(G) \right] [\lambda_-^l(G, z) - \lambda_-^l(G, z')] + \\
 &+ \left[e^{i\pi(z-z')/a} / 2\pi i(z-z') \right] \sum_{l=1}^M \sum_G \left[\delta V_{nr}^l \left(G + \frac{2\pi}{a} \right) e^{-i2\pi z/a} - \delta V_{nr}^l(G) \right] \times \\
 &\times [\lambda_+^l(G, z) - \lambda_+^l(G, z')], \tag{28}
 \end{aligned}$$

где

$$\lambda_+^l(G, z) = \frac{L}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dk e^{ikz} \Phi^l(k + G), \tag{29}$$

$$\lambda_-^l(G, z) = [\lambda_+^l(-G, z)]^*. \tag{30}$$

Очевидно равенство

$$\lambda^l(G, z) = \lambda_+^l(G, z) + \lambda_-^l(G, z). \tag{31}$$

Рассмотрим теперь некоторые конкретные примеры.

А. Пусть функция $\theta^l(z)$ изменяется линейно от нуля до единицы в области гетерограниц и принимает значения $\theta^l(z) = 1$ — на интервале $(z_1^l + \varepsilon_1^l; z_2^l - \varepsilon_2^l)$, изменяется линейно по z на интервалах $(z_i^l - \varepsilon_i^l; z_i^l + \varepsilon_i^l)$, где $i = 1, 2$ и равна нулю во всех других областях. Для такого выбора $\theta^l(z)$ функции $\lambda_+^l(G, z)$ и $\Phi^l(k + G)$ примут вид (для $G \neq 0$)

$$\Phi^l(k + G) = \frac{1}{iL(k + G)^2} \sum_{p=1}^2 (-1)^{p+1} \frac{\sin [(k + G)\varepsilon_p^l]}{\varepsilon_p^l} \exp [-i(k + G)z_p^l], \tag{32}$$

$$\begin{aligned}
 \lambda_+^l(G, z) &= \sum_{p=1}^2 \sum_{r,j=0}^1 (-1)^{r+p+j} \frac{e^{-iGz}}{4\pi \varepsilon_p^l (G + r\frac{\pi}{a})} \times \\
 &\times \left[\exp^{i\alpha_{pr}^{lj}} + \alpha_{pr}^{lj} (\text{Si}(\alpha_{pr}^{lj}) - i\text{Ci}(\alpha_{pr}^{lj})) \right],
 \end{aligned}$$

где

$$\alpha_{pr}^{lj} = \left(G + r\frac{\pi}{a} \right) (z - z_p^l + (-1)^j \varepsilon_p^l). \tag{33}$$

Здесь $\text{Si}(z)$ и $\text{Ci}(z)$ — интегральные синус и косинус. Из выражения для $\lambda_+^l(G, z)$ с $G \neq 0$ можно получить $\lambda_+^l(0, z)$, если сначала выполнить суммирование по p и j с $G \neq 0$, а потом устремить G к нулю. В этом случае $\lambda_+^l(0, z)$ остается конечной величиной.

Б. Пусть $\theta^l(z)$ можно представить в виде суперпозиции арктангенсов при условии $\sum_j \gamma_{pj}^l = 1$:

$$\theta^l(z) = \frac{1}{\pi} \sum_j \sum_{p=1}^2 (-1)^{p+1} \gamma_{pj}^l \operatorname{arctg} [(z - z_{pj}^l) / \varepsilon_{pj}^l]. \quad (34)$$

При таком представлении $\theta^l(z)$ близка к единице внутри l -го слоя, близка к нулю вне его и плавно изменяется от нуля до единицы в области гетерограниц. Здесь z_{1j}^l находится вблизи левой границы слоя l , а z_{2j}^l — вблизи правой. Величины ε_{pj}^l имеют размерность длины и характеризуют ширину плавной гетерограницы. Для такого выбора $\theta^l(z)$ функции $\lambda_+^l(G, z)$ и $\Phi^l(k + G)$ примут вид ($G \neq 0$)

$$\Phi^l(k + G) = \frac{1}{iL(k + G)} \sum_{p=1}^2 \sum_j (-1)^{p+1} \gamma_{pj}^l \exp[-i(k + G)z_{pj}^l] \exp(-|k + G|\varepsilon_{pj}^l), \quad (35)$$

$$\lambda_+^l(G, z) = \frac{e^{-iGz}}{2\pi i} \sum_j \sum_{p=1}^2 \sum_{f=0}^1 (-1)^{p+f} \gamma_{pj}^l E_1 \left\{ \left(G + f \frac{\pi}{a} \right) [\varepsilon_{pj}^l \operatorname{sign}(G) - i(z - z_{pj}^l)] \right\}.$$

Здесь $E_1(z)$ — интегральная показательная функция (см. [8]), $\lambda_+^l(0, z)$ определяется так же, как в примере А.

В. Если в (32) и (35) совершить предельные переходы $\varepsilon_p^l \rightarrow 0$ и $\varepsilon_{pj}^l \rightarrow 0$ соответственно, то $\Phi^l(k + G)$ примет вид

$$\Phi^l(k + G) = \frac{1}{iL(k + G)} \sum_{p=1}^2 (-1)^{p+1} \exp[-i(k + G)z_p^l]. \quad (36)$$

Такой предельный переход соответствует переходу к модели гетерограницы с резким скачком потенциала, т. е. на интервале (z_1^l, z_2^l) функция $\theta^l(z) = 1$ и $\theta^l(z) = 0$ во всех других областях. Отметим, что по сравнению с (36) в (35) и (32) под знаком суммы появляются дополнительные множители:

$$\frac{\sin((k + G)\varepsilon_p^l)}{(k + G)\varepsilon_p^l} \quad \text{и} \quad \exp(-|k + G|\varepsilon_{pj}^l).$$

Эти множители для $G \neq 0$ по модулю меньше единицы и убывают с ростом G , что обеспечивает уменьшение абсолютной величины значений $\Phi^l(k + G)$ и $\lambda_+^l(G, z)$ в примерах А и В по сравнению со случаем резкой гетерограницы. Следовательно, пренебрежение членами суммы с $G \neq 0$ в выражениях для $V_{nr}(z)$ и $V_{nr}^{(n)}(z)$ будет давать меньшие ошибки в случае гетерограницы с плавным изменением потенциала, чем в случае скачкообразного изменения потенциала. Можно показать, что в

примерах A и B при увеличении ε_p^l и ε_{pj}^l абсолютное значение $\lambda_+^l(G, z)$ уменьшается (в том числе и при $G = 0$), поэтому в случае больших ε_p^l и ε_{pj}^l (что соответствует протяженным и плавным гетерограницам) можно пренебречь $V_{nr}^{(n)}(z, z')$ и членами суммы с $G \neq 0$ в выражении для $V_{nr}(z)$. Для гетерограниц с резким скачком потенциала $\lambda_+^l(G, z)$ примет вид

$$\lambda_+^l(z) = \frac{e^{-iGz}}{2\pi i} \sum_{p=1}^2 (-1)^{p+1} \sum_{j=0}^1 \left\{ \text{Ci} \left[(G+j\frac{\pi}{a})(z-z'_p) \right] + i\text{Si} \left[(G+j\frac{\pi}{a})(z-z'_p) \right] \right\}.$$

Для того, чтобы лучше понять, какова величина членов суммы с $G \neq 0$ в выражении для $V_{nr}(z)$, рассмотрим конкретный пример гетерограницы. Выберем в качестве кристаллического потенциала потенциал Кронига-Пенни с шириной барьера, равной ширине ямы b , с глубиной ямы V^0 и $V^0 + \delta V^0$ по разные стороны от гетерограницы, высоту барьера будем считать неизменной по обе стороны от гетерограницы. Пусть резкая гетерограница проходит через середину барьера, туда же поместим начало отсчета координаты z . В качестве $\theta(z)$ возьмем функцию Хэвисайда. Будем считать ямы в потенциале Кронига-Пенни достаточно глубокими, чтобы можно было воспользоваться приближением бесконечно глубокой ямы для волновых функций.

В пренебрежении членами суммы с $G \neq 0$ получим

$$V_{nr}(z) = V_{nr}^0 + \delta V^0 \delta_{nr} \theta(z). \quad (37)$$

Здесь член $\delta V_{nr}(z)$ диагонален из-за приближения бесконечно глубокой ямы. С учетом суммирования по G получим

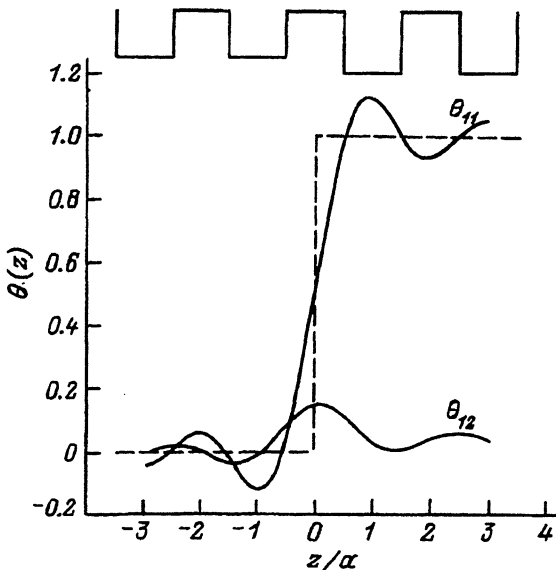
$$V_{nr}(z) = V_{nr}^0 + \delta V^0 \theta_{nr}(z),$$

$$\begin{aligned} \theta_{nr}(z) &= \sum_{j=1}^{\infty} \frac{4}{\pi} \int_1^3 \frac{dt (-1)^{n+r}}{t-4j+2z/b} \sin\left(\frac{\pi}{4}(t-4j+\frac{2z}{b})\right) \sin\left(\frac{\pi n(1-t)}{2}\right) \sin\left(\frac{\pi r(1-t)}{2}\right) = \\ &= \frac{1}{2\pi} \sum_f \sum_k \sum_p \sum_{t=0}^1 (-1)^{f+k+p+t+n+r} \sum_j \exp\left\{i\frac{\pi}{2} \left[n(-1)^k + r(-1)^p \right] \times \right. \\ &\quad \left. \times \left(1 + \frac{2x}{b} - 4j \right) \right\} \left[\text{Ci} \left(\beta_{nrj}^{fkpt} \right) + i\text{Si} \left(\beta_{nrj}^{fkpt} \right) \right], \quad (38) \end{aligned}$$

где

$$\beta_{nrj}^{fkpt} = \frac{\pi}{2} \left(\frac{1}{2}(-1)^f - n(-1)^k - r(-1)^p \right) \left(2\left(1 + \frac{z}{b} - 2j \right) + (-1)^t \right).$$

При $z = (\pm 0.5 - 1)b$ в (38) сначала необходимо провести все суммирования с $z \neq (\pm 0.5 - 1)b$, а затем перейти к пределу $z \rightarrow (\pm 0.5 - 1)b$. Тогда (38) остается конечной величиной.



Графики функций $\theta_{ij}(z)$ для $i, j = 1, 2$ (см. текст). $\theta_{22}(z)$ совпадает с $\theta_{11}(z)$. Штриховой линией изображена функция Хэвисайда. В верхней части рисунка схематически изображен профиль потенциала $V(z)$.

Графики функций $\theta_{nr}(z)$, ($n, r = 1, 2$) приведены на рисунке. За исключением области $\pm 2a$, функции θ_{11} и θ_{22} близки к функции Хэвисайда, а функция θ_{12} близка к нулю. Такой вид $\theta_{nr}(z)$ позволяет сделать вывод о том, что при вычислении электронных состояний в гетероструктурах с тонкими слоями в выражении для $V_{nr}(z)$ необходимо учитывать члены суммы с $G \neq 0$, что существенно осложняет задачу, поскольку требует знания $\delta V_{nr}(G)$ с $G \neq 0$.

Однако эти осложнения можно устранить. Заметим, что если в уравнениях для огибающих функций пренебречь нелокальным членом и членами суммы с $G \neq 0$ в выражении (25) для $V_{nr}(z)$, то получившиеся уравнения будут точными при условии, что разложение огибающих по плоским волнам уже не ограничено первой зоной Бриллюэна. Для доказательства этого факта подставим в точное уравнение Шредингера (1) волновую функцию $\Phi(z)$ в виде (2), где $F_n(z)$ заменены на $\varphi_n(z)$ — огибающие функции, разложение которых по плоским волнам уже не ограничено первой зоной Бриллюэна (теперь, очевидно, существует множество наборов $\varphi_n(z)$, соответствующих одному решению исходного уравнения Шредингера):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \sum_n \left(\frac{d^2 \varphi_n}{dz^2} U_n + 2 \frac{d\varphi_n}{dz} \frac{dU_n}{dz} + \varphi_n \frac{d^2 U_n}{dz^2} \right) + (V^0 + \delta V) \sum_n \varphi_n U_n = E \sum_n \varphi_n U_n. \quad (39)$$

Подставим в (39) $\delta V(z)$ в форме (14):

$$\delta V(z) \sum_n \varphi_n U_n = \sum_l \theta^l(z) \delta V^l(z) \sum_n \varphi_n U_n = \sum_n \sum_r \sum_l \theta^l(z) \delta V_{nr}^l \varphi_r U_n. \quad (40)$$

Подставим также в (39) dU_n/dz в следующем виде:

$$\frac{dU_n}{dz} = -\frac{1}{i\hbar} \sum_r p_{nr} U_r. \quad (41)$$

Выбрав в качестве $U_n(z)$ собственные функции базисного кристалла в центре зоны Бриллюэна, получим из (39)

$$\sum_n U_n \left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi_n}{dz^2} - \frac{i\hbar}{m} \sum_r p_{nr} \frac{d\varphi_r}{dz} + \sum_r \sum_l \theta^l(z) \delta V_{nr}^l \varphi_r - (E - E_n) \varphi_n \right] = 0. \quad (42)$$

Заметим теперь, что равенства нулю выражений в квадратных скобках совпадают с уравнениями для огибающих в пренебрежении нелокальным членом и членами суммы с $G \neq 0$ в $\delta V_{nr}(z)$, и решение системы этих уравнений приводит к решению исходного уравнения Шредингера (1):

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \varphi_n}{dz^2} - \frac{i\hbar}{m} \sum_r p_{nr} \frac{d\varphi_r}{dz} + \sum_r \sum_l \theta^l(z) \delta V_{nr}^l \varphi_r - (E - E_n) \varphi_n = 0. \quad (42a)$$

Отказываясь от единственности разложения по огибающим, мы получаем упрощенную систему уравнений для огибающих (42a), но при этом теряется взаимнооднозначное соответствие между решениями исходного уравнения Шредингера (1) и системы уравнений (42a), т. е. теперь могут существовать несколько решений уравнений для огибающих, которые соответствуют одному решению (1), и могут существовать решения (1), которые не даются решениями уравнений для огибающих. Поскольку мы теперь не ограничиваем разложение огибающих функций $\varphi_n(z)$ первой зоной Бриллюэна и единственность разложения (1) теряется, то существует множество наборов $\varphi_n(z)$, соответствующих одной $\Psi(z)$. Можно показать, что все наборы $\varphi_n(z)$, удовлетворяющие равенству

$$F_r(k) = \sum_n \sum_G \sum_{G'} \varphi_n(k + G - G') U_{r,G'}^* U_{n,G}; \quad (43)$$

соответствуют одной $\Psi(z)$. Здесь $F_n(k)$ и $\varphi_n(k + G)$ — фурье-компоненты разложения $F_n(z)$ и $\varphi_n(z)$ по плоским волнам. Они удовлетворяют уравнениям

$$\begin{aligned} & \frac{\hbar^2}{2m} k^2 F_n(k) + \frac{\hbar}{m} k \sum_r p_{nr} F_r(k) + \\ & + \sum_{l=1}^m \sum_r \sum_G \sum_{G'} \sum_{G''} \sum_{k'} U_{nG}^* \delta V_{G-G'-G''}^l \Phi^l(k - k' + G'') U_{rG'} F_r(k') = \\ & = (E - E_n) F_n(k), \end{aligned} \quad (44)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} (k+G)^2 \varphi_n(k+G) + \frac{\hbar}{m} (k+G) \sum_{\tau} p_{n\tau} \varphi_{\tau}(k+G) +$$

$$+ \sum_{l=1}^M \sum_{\tau} \sum_{G_1} \sum_{G_2} \sum_{G'} \left[U_{nG_1}^* \delta V_{G_1-G_2}^l U_{\tau G_2} \sum_{k'} \Phi^l(k-k'+G-G') \varphi_{\tau}(k'+G') \right] =$$

$$= (E - E_n) \varphi_n(k+G). \quad (45)$$

В уравнениях (45) проведем замену $G \rightarrow G - \tilde{G}$, домножим эти уравнения на $U_{n,\tilde{G}}$ и $U_{v,\tilde{G}}$ и просуммируем по n , G и \tilde{G} . Используя равенства

$$\hbar G U_{n,G} = \sum_{\tau} p_{r\tau} U_{\tau,G}, \quad (46)$$

$$\frac{\hbar^2}{2m} G^2 U_{n,G} + \sum_{G'} V_{G-G'}^0 U_{n,G'} = E_n U_{n,G}, \quad (47)$$

которые следуют из определения матричного элемента импульса и уравнения Шредингера для массивного полупроводника с набором собственных функций в центре зоны Бриллюэна $U_n(z)$, можно привести получившуюся систему к системе (44), где вместо $F_n(k)$ стоят линейные комбинации $\varphi_n(k+G)$, определяемые равенством (43). Таким образом, линейными преобразованиями в системе уравнений (45) удалось выделить замкнутую подсистему, спектр которой совпадает со спектром уравнений (44), т. е. в спектре системы (45) содержится весь спектр системы (44), обратное следует из (42) для нетривиальных решений $\Psi(z)$. Следовательно, спектры (44) и (45) совпадают, если рассматриваются решения (45) с ненулевыми линейными комбинациями (43).

3. Заключение

В настоящей работе проанализированы различные частные примеры применения точной формулировки метода огибающих, предложенный Бартом [6,7], к задачам изучения гетероструктур и сверхрешеток. В этой формулировке огибающие функции $F_n(z)$ являются по определению плавными функциями, однако уравнения для них, как показывают рассмотренные примеры, оказываются достаточно сложными. При практическом применении этих уравнений приходится идти на упрощения, приводящие к нарушению требования плавности функций $F_n(z)$. Мы предложили другие, более простые уравнения для огибающих, отказавшись от требования однозначного определения последних, а именно вместо огибающих функций $F_n(z)$ предложили использовать функции $\varphi_n(z)$, которые не обязаны быть плавными. Мы показали, что энергетические спектры, описываемые новыми уравнениями (42а) и старыми уравнениями (3), совпадают, если линейные комбинации (43) являются ненулевыми.

Таким образом, новые уравнения (42а) позволяют в рамках метода огибающих функций (отличных от предложенных Бартом [6,7]) корректно и относительно просто учесть конкретный вид потенциала на

гетерограницах для целей изучения энергетического спектра электронов в гетероструктурах и сверхрешетках. Полученные результаты относятся к одномерной задаче, их обобщение на трехмерный случай не имеет принципиальных ограничений.

Работа частично финансировалась Российским фондом фундаментальных исследований, грант 94-02-04765.

Список литературы

- [1] J.M. Luttinger, W. Kohn. Phys. Rev., **97**, 869 (1955).
- [2] Л.В. Келдыш. ЖЭТФ, **45**, 364 (1963).
- [3] S.R. White, L.J. Sham. Phys. Rev. Lett., **47**, 879 (1981).
- [4] G. Bastard. Phys. Rev., **B24**, 5693 (1981).
- [5] M. Altarelli. Phys. Rev. B, **28**, 842 (1983).
- [6] M.G. Burt. Semicond. Sci. Technol., **3**, 739 (1988).
- [7] M.G. Burt. J. Phys.: Condens. Matter., **4**, 6651 (1992).
- [8] *Справочник по специальным функциям*, под ред. М. Абрамовиц, И. Стиган. (М., Наука, 1979).

Редактор Т.А. Полянская

A Method of Enveloping Functions for Description Electron States in Microstructures with Smooth Variation of the Potential at Heterointerfaces

G.F. Karavaev, I.N. Krivorotov

V.D. Kuznetsov Siberian Physicotechnical Institute, 634050 Tomsk, Russia
