

МЕТОД СЛАБОЙ СВЯЗИ ДЛЯ РАСЧЕТА СПЕКТРА НОСИТЕЛЕЙ В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ

© А.Д.Андреев, Р.А.Суриц

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе Российской академии наук,
194021 Санкт-Петербург, Россия
(Получена 29 августа 1995 г. Принята к печати 4 сентября 1995 г.)

В работе предложен метод расчета энергетического спектра и волновых функций носителей в полупроводниковых гетероструктурах, основанный на приближении слабой связи. Показано, что данный метод может быть эффективно использован для широкого класса гетероструктур как в отсутствии, так и в присутствии внешнего магнитного поля, направленного вдоль оси гетероструктуры. Исследованы особенности спектра дырок в сверхрешетках, состоящих из ультратонкого слоя одного и толстого слоя другого полупроводника. Показано, что в таких сверхрешетках волновые функции дырок представляют собой суперпозицию нескольких объемных состояний легких и тяжелых дырок с учетом их смешивания на гетерогранице. Рассчитан и проанализирован спектр дырок в сверхрешетках, состоящий из несимметричных треугольных ям.

1. Введение

Полупроводниковые структуры широко исследуются в настоящее время. Для анализа оптических и электрических свойств таких структур необходимо прежде всего знать энергетический спектр и волновые функции носителей в них. Существует ряд методов расчета спектра, основная часть которых основывается на приближении огибающих волновых функций [1-5]. В рамках этого приближения задача о нахождении спектра и волновых функций сводится к решению уравнения Шредингера для многокомпонентной огибающей волновой функции с некоторым эффективным гамильтонианом. Число компонент (т.е. число базисных блоховских функций) при этом равно числу зон объемного полупроводника (с учетом спина), учитываемых в рамках конкретного метода. Достоинством приближения огибающих является возможность учета различных возмущений (таких как упругие напряжения, электрические и магнитные поля) путем внесения соответствующих изменений в эффективный гамильтониан. При этом микроскопические характеристики кристаллического поля полупроводников, составляющих гетероструктуру, входят в эффективный гамильтониан в

виде параметров. Эти параметры в общем случае являются разрывными функциями координаты вдоль оси гетероструктуры, так как они различны для разных полупроводниковых соединений. При этом возникает необходимость задания граничных условий для компонент огибающих и их производных на интерфейсах двух материалов. Однако выбор граничных условий существенно зависит от формы эффективного гамильтониана и до сих пор нет общепринятой точки зрения на этот вопрос [6].

В настоящей работе предложен общий метод расчета энергетического спектра и волновых функций в различных полупроводниковых структурах. Наш метод основан на разложении по плоским волнам в рамках приближения огибающих и не требует специальной сшивки волновых функций на каждой гетерогранице.

Как известно, в теории твердого тела существуют два альтернативных метода расчета спектров носителей — сильной связи и метод почти свободных электронов (метод слабой связи) [7]. В то время как метод сильной связи отталкивается от волновых функций для отдельных ячеек (атомов), в методе слабой связи потенциал решетки считается возмущением и разложение ведется по волновым функциям свободных носителей (плоским волнам). Для расчета спектра носителей в полупроводниковых гетероструктурах хорошо разработаны методы в рамках приближения сильной связи [8,9], однако, насколько нам известно, слабо развиты методы, основанные на приближении слабой связи разложения по плоским волнам. Данная работа имеет целью восполнить этот пробел.

Представляется очевидным, что для ряда гетероструктур, для которых потенциал структуры в определенном смысле можно считать малым, волновые функции носителей формируются из небольшого числа плоских волн, так, что метод слабой связи оказывается особенно эффективным и позволяет интерпретировать спектр носителей в такой структуре. Такая ситуация реализуется для структур с ультратонкими слоями и сверхрешеток с относительно невысокими барьерами. В последнее время технология достигла уровня, при котором оказывается возможным вырастить практически бездефектные гетероструктуры с малым числом слоев (вплоть до монослоя). В этой связи развитие метода слабой связи представляется особенно актуальным. Более того, очевидно, что если возмущение и не мало, мы можем решить задачу о нахождении спектра и волновых функций носителей, учитывая необходимое число плоских волн.

Существенным преимуществом предлагаемого метода является возможность расчета спектра и волновых функций носителей в сверхрешетках с произвольной (непрямоугольной) формой потенциала. В последнее время усилился интерес к несимметричным треугольным ямам в связи с появлением нового метода их выращивания [10,11] и их возможным практическим применением [12,13]. В настоящей работе, в качестве иллюстрации эффективности работы нашего метода, рассчитан спектр электронов и дырок в сверхрешетках с несимметричными треугольными ямами и исследовано спиновое расщепление уровней размерного квантования в таких структурах.

Суть предлагаемого метода кратко заключается в следующем. Мы рассматриваем периодические гетероструктуры — сверхрешетки.

Болновая функция носителей ищется в рамках приближения огибающих в виде суперпозиции плоских волн. Плоские волны в данном случае — это состояние носителей в однородном полупроводнике, рассчитанные в рамках заданной многозонной модели. При этом выбор модели может быть любым и определяется конкретными целями расчета. Для каждого типа носителей число плоских волн, участвующих в формировании волновой функции в гетероструктуре, ограничено рамками приближения огибающих и не может быть больше числа слоев, укладываемых в одном периоде сверхрешетки. В конечном итоге задача о нахождении энергетического спектра носителей и их волновых функций сводится к нахождению собственных значений и векторов эрмитовой матрицы. Предлагаемый метод может быть также использован и тогда, когда исследуемая структура не является периодической. В этом случае такую структуру можно заменить периодической с большим периодом. Например, в случае одиночной квантовой ямы это можно сделать, рассматривая вместо ямы сверхрешетку с достаточно толстыми барьерами так, чтобы туннелированием носителей между отдельными ямами можно было пренебречь.

2. Разложение по плоским волнам

Как известно [1-5], в рамках метода огибающих волновая функция носителей в гетероструктуре может быть представлена в виде

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha=1}^N \varphi_{\alpha}(\mathbf{r}) u_{\alpha}(\mathbf{r}), \quad (1)$$

где u_{α} — базисные блоховские функции, φ_{α} — компонента вектора огибающей волновой функции $\Psi(\mathbf{r})$, N — число базисных функций, т. е. число зон, учитываемых в данной модели (с учетом их вырождения по спину).

Будем предполагать, что базисные блоховские функции можно считать одинаковыми для разных материалов, составляющих гетероструктуру. Тогда для компонент вектора φ_{α} имеем систему дифференциальных уравнений, которые можно записать в виде

$$\hat{H}\varphi = E\varphi, \quad (2)$$

где \hat{H} — эффективный гамильтониан, представляющий собой матрицу операторов $N \times N$, E — энергия носителей. Гамильтониан \hat{H} может быть получен из объемного гамильтониана используемой многозонной модели путем замены $\hat{k}_z \rightarrow -i\partial/\partial z$. Следует также считать параметры, входящие в объемный гамильтониан функциями z (z — координата вдоль оси гетероструктуры). Для нахождения спектра удобно представить \hat{H} в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad (3)$$

где \hat{H}_0 — гамильтониан объемного полупроводника (например, одного из составляющих гетероструктуру), \hat{V} — остаток, зависящий от координаты z вдоль оси гетероструктуры. Как уже указывалось, мы ограничимся периодическими структурами (сверхрешетками). Пусть d — период сверхрешетки, тогда компоненты матрицы \hat{V} — периодические функции z .

В многоволновом приближении решение (2) ищется в виде разложения по плоским волнам:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{s=1}^N \sum_n C_{sn} |\mathbf{q}, p - n\tau, s\rangle. \quad (4)$$

Здесь $\tau = 2\pi/d$ — вектора обратной решетки в направлении z , \mathbf{q} — квазиимпульс в плоскости слоя, p — квазиимпульс вдоль оси z , C_{sn} — коэффициенты разложения, $|\mathbf{q}, p - n\tau, s\rangle$ — собственные волновые функции объемного гамильтониана \hat{H}_0 , имеющие вид

$$|\mathbf{q}, p - n\tau, s\rangle = \sum_{\alpha=1}^N u_{\alpha}(\mathbf{r}) B_{\alpha}(\mathbf{q}, p - n\tau, s) e^{i\mathbf{q}\rho} e^{i(p-n\tau)z}, \quad (5)$$

где ρ — координата в плоскости слоев сверхрешетки, $B_{\alpha}(\mathbf{q}, p - n\tau, s)$ — коэффициенты, зависящие от параметров гамильтониана \hat{H}_0 , индекс $s = 1 \dots N$ обозначает состояния (с учетом спина), соответствующие разным типам носителей (электронам, легким, тяжелым и спинотщепленным дыркам). Волновые функции (5) описывают состояния «свободных» частиц, т.е. состояния носителей в объемном однородном полупроводнике.

Для получения точного решения в рамках данной многозонной модели с гамильтонианом \hat{H} необходимо провести суммирование по всем целым значениям n . При этом разложение (4) является разложением в дискретный ряд Фурье. Однако всегда можно достичь требуемой точности, ограничившись конечным числом слагаемых:

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{s=1}^N \sum_{|n| \leq W(s)} C_{sn} |\mathbf{q}, p - n\tau, s\rangle. \quad (6)$$

В (6) мы ограничили суммирование по n некоторым максимальным числом волн $W(s)$, которое зависит от номера состояния s . Очевидно, что в зависимости от того, в какой области энергий требуется найти энергетический спектр, для достижения заданной точности в разложение (6) включать нужно разное число волн, различное для разных состояний в зонах s . Это и означает зависимость $W(s)$. Для достижения необходимой точности всегда можно выбрать $W(s)$ для разных s такими, что при увеличении максимального числа волн $W(s)$ на единицу результат не изменяется в пределах заданной точности.

Здесь, однако, следует сделать одно существенное замечание. Как уже указывалось выше, для получения точного с математической точки зрения решения системы (2), в выражении (4) необходимо суммировать по всем целым значениям n . Однако следует помнить, что метод огибающих — приближенный метод. Решение, полученное в рамках этого метода, должно медленно меняться на расстояниях порядка постоянной решетки материала. Отсюда следует, что слагаемые в (4) и (6), соответствующие большим квазиимпульсам, т.е. большим номерам волн n , следует отбросить, так как они выводят нас за рамки

используемого приближения метода огибающих. Это приводит нас к верхней оценке для допустимого максимального числа учитываемых в (6) волн: $n\tau < 2\pi/a$, т.е. $n < d/a$, где a — средняя постоянная решетки полупроводников, составляющих сверхрешетку. Таким образом, число волн для всех состояний (электронов, легких, тяжелых и спин-отщепленных дырок) не может превышать числа слоев в одном периоде сверхрешетки.

Подставляя разложение (6) в уравнение (2) и умножая скалярно на волновые функции «свободных» носителей $|\mathbf{q}, p - n\tau, s\rangle$, получаем, что уравнение Шредингера принимает следующий вид:

$$\sum_{s'=1}^N \sum_{|n'|\leq W(s)} A_{sn, s'n'} C_{s'n'} = EC_{sn}, \quad (7)$$

где матрица A имеет вид

$$A_{sn, s'n'} = E_0(\mathbf{q}, p - n\tau, s) \delta_{ss'} \delta_{nn'} + \langle \mathbf{q}, p - n\tau, s | \hat{V}(z) | \mathbf{q}, p - n'\tau, s' \rangle. \quad (8)$$

Здесь $E_0(\mathbf{q}, p - n\tau, s)$ — энергия состояния $|\mathbf{q}, p - n\tau, s\rangle$. Используя выражение (5) для состояния «свободных» частиц, легко выписать выражение для матричного элемента оператора возмущения \hat{V} , входящего в (8):

$$\langle \mathbf{q}, p - n\tau, s | \hat{V}(z) | \mathbf{q}, p - n'\tau, s' \rangle = \sum_{\alpha, \alpha'=1}^N B_{\alpha}^*(\mathbf{q}, p - n\tau, s) B_{\alpha'}(\mathbf{q}, p - n'\tau, s') V_{\alpha\alpha'}(n - n'). \quad (9)$$

Здесь $V_{\alpha\alpha'}(n - n')$ — коэффициент с номером $(n - n')$ в разложении в ряд Фурье элемента $V_{\alpha\alpha'}$ матрицы \hat{V} (напомним, что \hat{V} — матрица $N \times N$).

Таким образом, задача о нахождении спектра и волновых функций носителей в сверхрешетке свелась к нахождению собственных чисел и векторов матрицы (8). При этом профиль потенциала гетероструктуры и параметры гамильтониана \hat{H} , являющиеся периодическими функциями z , входят в матрицу (8) лишь в виде своих фурье-компонент. Следовательно, конкретный вид этой зависимости от z не существует для излагаемого метода. Далее для примера рассматривается случай потенциала в виде несимметричной треугольной ямы.

В исходную многозонную модель могут быть включены упругие напряжения и электрические поля. О модификации метода в случае наличия внешнего магнитного поля, направленного вдоль оси сверхрешетки, речь пойдет далее. Следует также особо отметить, что для данного метода не требуется знать граничных условий, так как получаемое решение естественным образом им удовлетворяет.

Собственные числа и вектора матрицы (8) могут быть найдены численно, используя любой известный метод. В настоящей работе мы использовали метод Якоби с преградами [14].

3. Предел слабой связи

Обсудим вначале предельный случай, когда спектр и волновые функции носителей формируются из небольшого числа плоских волн. Этот случай соответствует пределу слабой связи. Рассмотрим сверхрешетку, в которой потенциал структуры \hat{V} можно считать малым. Критерий малости мы обсудим далее. Как мы увидим, этому критерию, в частности, удовлетворяют сверхрешетки, состоящие из очень тонкого слоя одного и достаточно толстого слоя другого полупроводника. В зависимости от соотношения между зонными параметрами этих двух материалов мы имеем дело со сверхрешеткой, состоящей либо из ультратонких квантовых ям, либо из тонких барьеров (либо и то и другое, если рассматриваемая пара полупроводников образует структуру II типа).

Проследим, как формируется спектр дырок в такой сверхрешетке. Для простоты будем использовать в качестве исходной многозонной модели изотропную модель Кейна с учетом конечности массы тяжелой дырки [15-17]:

$$[E - E_g - V_c(x)]u - \gamma \hat{\mathbf{k}}\mathbf{v} = 0, \quad (10)$$

$$\left[E + g + V_v(x) + \frac{\hbar^2 \hat{\mathbf{k}}^2}{2m_{hh}} \right] \mathbf{v} - ig[\hat{\sigma}, \mathbf{v}] - \gamma \hat{\mathbf{k}}u = 0. \quad (11)$$

Здесь $\Psi(\mathbf{r}) = u|s\rangle + \mathbf{v}|\mathbf{p}\rangle$ — волновая функция носителей (см. (1)); $|s\rangle$ и $|\mathbf{p}\rangle$ — блоховские базисные функции s - и p -типа; $\hat{\mathbf{k}} = -i\nabla$; γ — кейновский матричный элемент; E_g — ширина запрещенной зоны; m_{hh} — эффективная масса тяжелой дырки; $V_c(z)$ и $V_v(z)$ — профили потенциалов зон проводимости и валентной соответственно; $g = \Delta_{so}/3$; Δ_{so} — константа спин-орбитального расщепления; $\hat{\sigma}$ — матрицы Паули. Энергия носителей в (10)–(11) отсчитывается от потолка валентной зоны.

В качестве примера для иллюстрации наших рассуждений используем сверхрешетку, состоящую из ненапряженных слоев $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{Sb}-\text{In}_{0.16}\text{Ga}_{0.84}\text{As}_{0.14}\text{Sb}_{0.86}$ толщиной 10 и 60 Å соответственно. Благодаря существованию двух типов дырок — легких и тяжелых — их спектр в пределе слабой связи существенно более сложен, чем в случае модели простой зоны, учитывающей только частицу с одной массой.

Для выяснения механизма формирования спектра дырок в пределе слабой связи построим спектр легких и тяжелых дырок $E_0(\mathbf{q}, p - n\tau, s)$ в объемном материале для разных волн $n = 0, 1, 2$ (невозмущенный спектр, определяемый гамильтонианом \hat{H}_0). При этом, что естественно, некоторые ветви для разных волн будут пересекаться (рис. 1). Для получения спектра дырок в сверхрешетке необходимо, согласно методу плоских волн, заменить пересечения на антипересечения и сдвинуть весь спектр как одно целое на постоянную величину ΔE . При этом пересечения между линиями волн n и n' , соответствующих дыркам одного типа, будут в основном определяться величиной компоненты Фурье с номером $(n - n')$ профиля потенциала валентной зоны $V_{\text{val}}(z)$. Эффекты влияния зоны проводимости и спин-отщепленной зоны малы в меру отношения ε/E_g и ε/Δ_{so} , где ε — характерная энергия рассматриваемых дырок, отсчитанная от потолка валентной зоны.

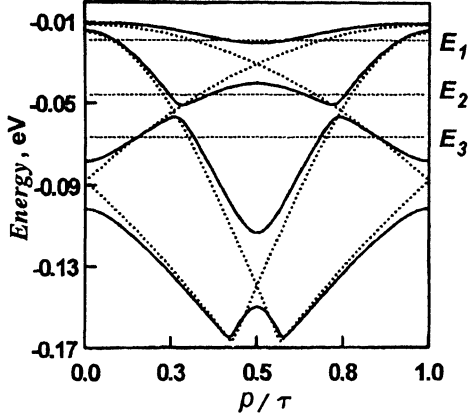


Рис. 1. Энергетические спектры дырок в зависимости от перпендикулярной компоненты импульса p при $q = 0.1\tau$. Сплошные линии — в сверхрешетке $\text{Al}_{0.4}\text{Ga}_{0.6}\text{Sb}-\text{In}_{0.16}\text{Ga}_{0.84}\text{As}_{0.14}\text{Sb}_{0.86}$ с толщинами слоев 10 и 60 Å; пунктирные — спектр плоских волн объемного $\text{In}_{0.16}\text{Ga}_{0.84}\text{As}_{0.14}\text{Sb}_{0.86}$, сдвинутые по энергии на величину $\Delta E = -0.012$ эВ (см. текст). Штриховыми прямыми обозначены характерные значения энергии E_1, E_2, E_3 . Значение $p = 0.5\tau$ соответствует границе зоны Бриллюэна сверхрешетки ($\tau = 2\pi/d$, $d = 70$ Å — период сверхрешетки), параметры структуры взяты из работы [6].

Как известно, в гетероструктурах происходит взаимная трансформация состояний легких и тяжелых дырок. Амплитуда этой трансформации пропорциональна импульсу q в плоскости слоев. Поэтому расщепление между волнами, соответствующими легким и тяжелым дыркам, будет отлично от нуля лишь при $q \neq 0$; при $q = 0$ такое расщепление будет отсутствовать.

Интересно проследить за эволюцией изоэнергетических поверхностей с увеличением энергии (рис. 2). При малых энергиях $E \simeq E_1$ (рис. 1) изоэнергетические поверхности как легких, так и тяжелых дырок не пересекают друг друга (рис. 2,а). При этом изоэнергетические поверхности практически совпадают с изоэнергетическими поверхностями «свободных» дырок объемного полупроводника (следует помнить, что между энергиями свободных дырок и дырок в сверхрешетке существует постоянный сдвиг ΔE). При увеличении энергии до $E \simeq E_2$ происходит пересечение поверхностей, соответствующих разным волнам тяжелых дырок. В результате расщепления (рис. 2,б) возникает одна открытая и одна закрытая поверхность, соответствующая локальному минимуму на границе зоны Бриллюэна $p = \tau/2$. При дальнейшем увеличении энергии закрытая поверхность исчезает, открытая же, практически не меняя свою форму, сдвигается в область больших q . При $E \simeq E_3$ происходит зацепление легких и тяжелых дырок, в результате чего образуется локальный минимум и максимум при $p \simeq (\tau/2)\sqrt{m_{lh}/m_{hh}}$ (рис. 2,с-д).

Рассматривая спектр дырок, величину потенциала валентной зоны $V_{\text{val}}(z)$ удобно характеризовать величиной

$$\alpha = \frac{2m_{hh}wd}{\hbar^2\pi^2} U_v, \quad (12)$$

где U_v — высота барьера для дырок, w — ширина ямы (или барьера). Характерная энергия n -й волны тяжелых дырок есть $E_n = (\hbar^2/2m_{hh})(n\pi/d)^2$; n -я фурье компонента потенциала при $nw \ll d$ равна $V_{\text{val}}(n) = (nw/d)U_v$. Условием того, что спектр сверхрешетки слабо отличается от объемного невозмущенного спектра (расщепления в областях пересечения волн малы по сравнению с энергией самых волн), т. е. условием малости потенциала будет $V_{\text{val}} \ll E_1$, откуда

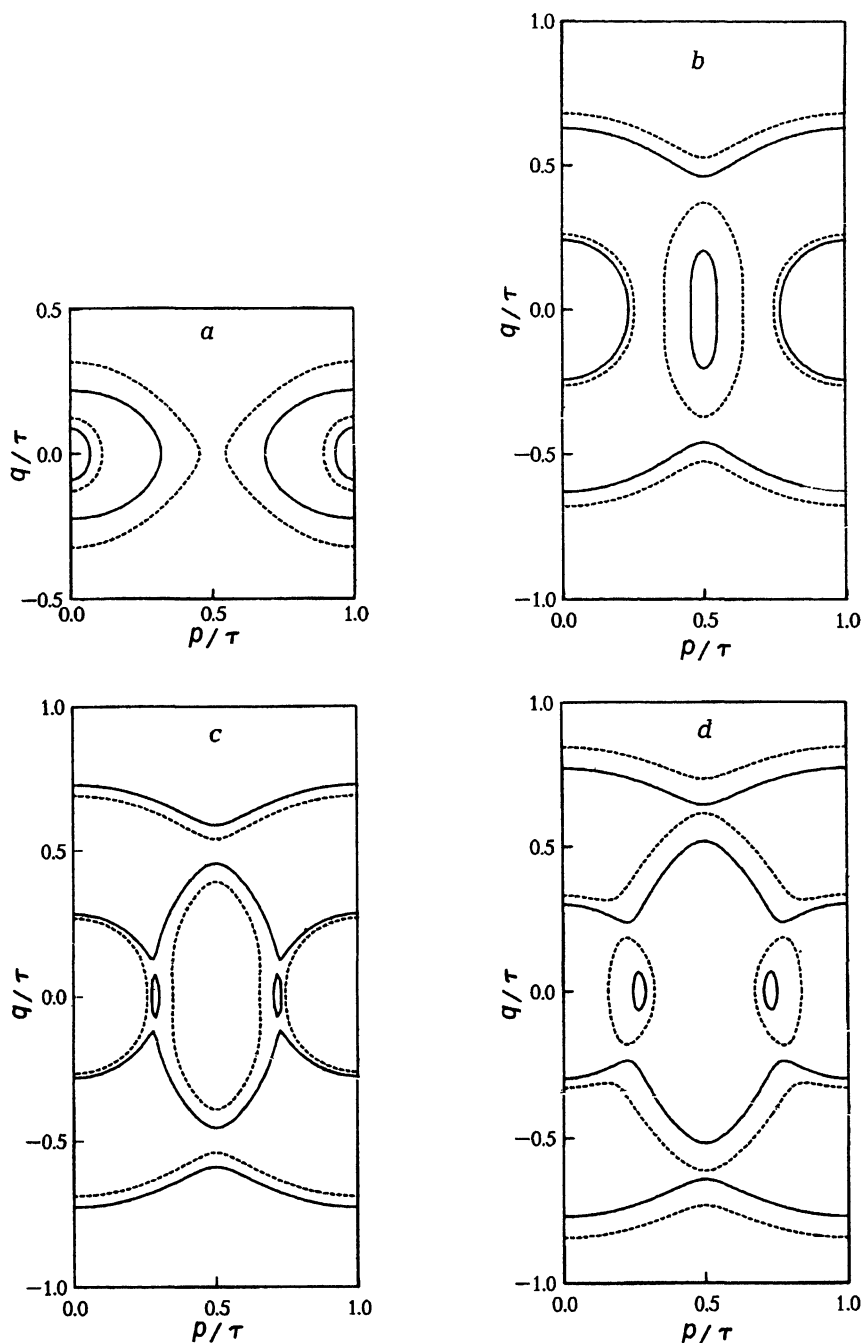


Рис. 2. Линии постоянной энергии спектра дырок, представленного на рис. 1. Сплошные и пунктирные линии соответствуют энергиям в мэВ: *a* — 6 и 10, *b* — 32 и 37, *c* — 42 и 38, *d* — 47 и 56. Энергия отсчитывается от первого уровня размерного квантования при $q = p = 0$.

$\alpha \ll 1$. Если потенциал мал, то носители «слабо чувствуют» потенциал и постоянный сдвиг ΔE оказывается порядка среднего значения потенциала. При этом следует считать, что $V_{\text{val}}(z) \equiv 0$ в области полупроводника, объемный спектр которого выбран в качестве невозмущенного. Таким образом, при $\alpha \leq 1$: $|\Delta E| \simeq U_v(w/d)$. При этом $\Delta E < 0$ и $\Delta E > 0$, если мы имеем дело со структурой, состоящей из узких квантовых ям или тонких барьеров для дырок соответственно.

Таким образом, при $\alpha \ll 1$ периодический потенциал для дырок мал и волновые функции формируются из нескольких плоских волн объемного материала. Как видно из (12), чем меньше отношение ширины узкого слоя к периоду w/d (при фиксированном d), тем лучше достигается предел слабой связи $\alpha \ll 1$. Это означает, что спектр и волновые функции носителей в сверхрешетках, состоящих из ультратонких квантовых ям или из тонких барьеров, хорошо описываются в рамках метода слабой связи. Чем меньше α , тем эффективнее этот метод, т. е. тем меньшим числом волн определяется спектр и волновые функции.

Проделанный анализ позволяет сделать следующий вывод. В сверхрешетках, состоящих из тонкого слоя одного материала ($w \ll d$) и толстого слоя другого материала, спектр носителей формируется согласно описанному выше механизму, соответствующему пределу слабой связи. При этом волновые функции дырок формируются из небольшого числа объемных состояний легких и тяжелых дырок с учетом их взаимной трансформации.

4. Точность метода плоских волн

Для иллюстрации эффективности метода плоских волн рассмотрим спектр в квантовой яме II типа [18] на основе $\text{Ga}_{0.8}\text{In}_{0.2}\text{As}_{0.18}\text{Sb}_{0.92}/\text{GaSb}$. Как уже отмечалось во введении, в случае квантовой ямы для расчета спектра по методу плоских волн следует заменить рассматриваемую квантовую яму на периодическую гетероструктуру — сверхрешетку — с достаточно толстыми барьерами. В нашем примере это означает, что необходимо рассматривать сверхрешетку с данной толщиной a слоя GaSb (a — толщина квантовой ямы для дырок) и толстым слоем $\text{Ga}_{0.8}\text{In}_{0.2}\text{As}_{0.18}\text{Sb}_{0.92}$ толщиной $(d - a)$, где d — период сверхрешетки.

В качестве многозонной модели используем модель Кейна (см. (10)–(11)). Это означает, что индекс s , обозначающий в (6)–(9) тип состояний, пробегает восемь значений, соответствующих состояниям (с учетом спина) тяжелых ($s = \mathcal{HH}$), легких ($s = \mathcal{LH}$) и спин-отщепленных ($s = \mathcal{SO}$) дырок и электронов ($s = \mathcal{E}$). Как уже отмечалось выше, для расчета спектра носителей (в нашем примере — дырок) для всех типов состояний s следует увеличивать максимальное число волн $W(s)$, учитываемых в разложении (6), до тех пор, пока рассчитанные уровни размерного квантования будут изменяться лишь в пределах заданной точности. Необходимые для этого насыщения значения $W(s) = W_{\text{sat}}(s)$ различны для разных s и зависят от параметров данной структуры. В рассматриваемом примере $E_g < \Delta_{\text{so}}$, следовательно, $W_{\text{sat}}(\mathcal{SO}) < W_{\text{sat}}(\mathcal{E})$. Так как в объемном материале масса тяжелых дырок m_{hh} больше, чем масса легких дырок m_{lh} , то $W_{\text{sat}}(\mathcal{LH})/W_{\text{sat}}(\mathcal{HH}) \sim$

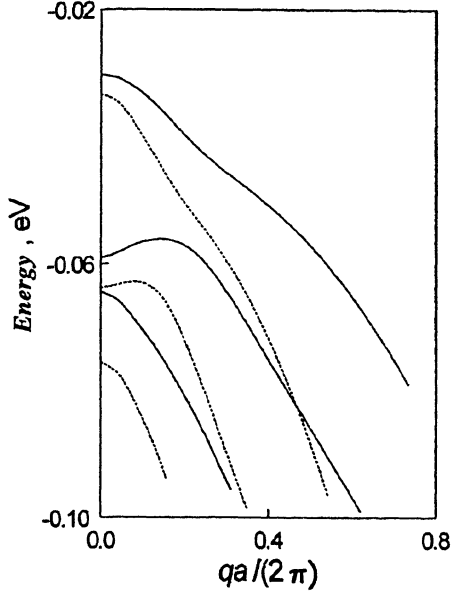


Рис. 3. Спектр дырок в квантовой яме II типа шириной 60 Å на основе Ga_{0.8}In_{0.2}As_{0.18}Sb_{0.92}/GaSb — сплошные линии. Пунктирные линии — спектр, полученный при учете недостаточного количества плоских волн (см. текст). Параметры структуры взяты из работы [18].

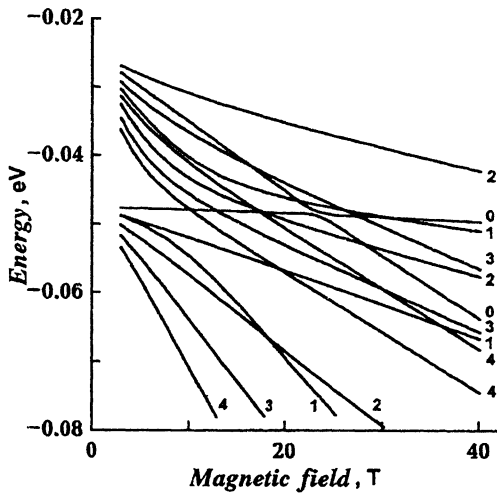


Рис. 4. Спектр дырок как функция магнитного поля, перпендикулярного гетерогранице в сверхрешетке GaAs—Ga_{0.7}Al_{0.3}As с толщинами слоев 40 и 60 Å. Цифры обозначают номера уровней Ландау (см. (14)). Энергия отсчитывается от края валентной зоны квантовой ямы.

$\sim \sqrt{m_{lh}/m_{hh}}$. Кроме того, очевидно, что $W_{\text{sat}}(\mathcal{E}) \ll W_{\text{sat}}(\mathcal{H}\mathcal{H})$. Для расчета уровней размерного квантования в квантовой яме необходимо также увеличивать период сверхрешетки d (при постоянной толщине ямы a) до значения d_{sat} , для которого ширина энергетических минизон не превышает заданной точности. Это означает, что туннелированием носителей (в нашем примере — дырок) можно пренебречь и, следовательно, рассчитанный спектр дырок в сверхрешетке с заданной точностью совпадает со спектром в квантовой яме. На рис. 3 приведен спектр дырок в квантовой яме II типа Ga_{0.8}In_{0.2}As_{0.18}Sb_{0.92}/GaSb шириной $a = 60 \text{ \AA}$, рассчитанный согласно описанному выше алгоритму. При точности расчета 0.1% значения $W_{\text{sat}}(s)$ оказываются равными: $W_{\text{sat}}(\mathcal{H}\mathcal{H}) = 18$, $W_{\text{sat}}(\mathcal{L}\mathcal{H}) = 7$, $W_{\text{sat}}(\mathcal{S}\mathcal{O}) = 3$, $W_{\text{sat}}(\mathcal{E}) = 4$; толщина барьера равна $d_{\text{sat}} = 200 \text{ \AA}$. Для примера на рис. 3 приведен также спектр дырок, получающийся при учете в (6) меньшего числа волн: $W_{\text{sat}}(\mathcal{H}\mathcal{H}) = 10$, $W_{\text{sat}}(\mathcal{L}\mathcal{H}) = 3$, $W_{\text{sat}}(\mathcal{S}\mathcal{O}) = 1$, $W_{\text{sat}}(\mathcal{E}) = 2$.

5. Спектр в магнитном поле

Покажем, каким образом модифицируется метод слабой связи в случае присутствия магнитного поля, направленного вдоль оси гетероструктуры (ось z). Для определенности ограничимся изотропной 4-зонной моделью Кейна, описанной выше; при этом число базисных

функций $N = 8$. Учет магнитного поля в (10)–(11) сводится к замене $\hat{\mathbf{k}} \rightarrow \hat{\mathbf{k}} + e\mathbf{A}/\hbar c$, где \mathbf{A} — векторный потенциал магнитного поля. В качестве блоховских функций $u_\alpha(\mathbf{r})$ в этом случае удобно выбрать базис, в котором волновые функции зоны проводимости являются сферическими функциями z -типа, а волновые функции валентной зоны — собственными функциями операторов J^2 и J_z (J — оператор полного момента) [19,20]. Для векторного потенциала магнитного поля \mathbf{A} будем использовать калибровку Ландау $A_x = -yH$, $A_y = A_z = 0$, где H — напряженность магнитного поля. Тогда выражение (4) для разложения полной волновой функции носителей в сверхрешетке по «плоским» волнам в магнитном поле примет вид

$$\Psi(\mathbf{r}) = \sum_{s=1}^8 \sum_n C_{sn} |l, p - n\tau, s\rangle. \quad (13)$$

Здесь l — квантовое число Ландау, $|l, p - n\tau, s\rangle$ — собственные волновые функции объемного гамильтониана \hat{H}_0 в присутствии магнитного поля, имеющие вид

$$|l, p - n\tau, s\rangle = \exp[i(p - n\tau)z] \begin{pmatrix} B_1 \chi_l(y) \\ B_2 \chi_{l-1}(y) \\ B_3 \chi_{l+1}(y) \\ B_4 \chi_l(y) \\ B_5 \chi_{l-1}(y) \\ B_6 \chi_{l-2}(y) \\ B_7 \chi_l(y) \\ B_8 \chi_{l-1}(y) \end{pmatrix}, \quad (14)$$

где $\chi_{t(\alpha)}(y)$ — осцилляторные функции с номером $t(\alpha)$, зависящим от α и l ; $B_\alpha \equiv B_\alpha(l, p - n\tau, s)$ — коэффициенты, подлежащие дальнейшему определению. Подставляя (14) в (2), для коэффициентов B_α получим систему линейных уравнений, зависящих от l , $(p - n\tau)$, H , и тем самым определим волновые функции (13) для свободных частиц.

Дальнейшая схема рассуждений аналогична случаю отсутствия магнитного поля. Задача о нахождении спектра и волновых функций носителей в сверхрешетке сводится к нахождению собственных чисел и векторов матрицы $A_{sn, s'n'}$, определяемой выражением (8). При этом импульс в плоскости слоев сверхрешетки \mathbf{q} следует заменить на квантовое число Ландау l .

На рис. 4 в качестве иллюстрации представлен спектр дырок в магнитном поле в сверхрешетке GaAs–Ga_{0.7}Al_{0.3}As с толщинами слоев 40 и 60 Å. Обращает на себя внимание существенно нелинейная зависимость энергии от магнитного поля, отмеченная ранее [20,21], являющаяся следствием взаимной трансформации тяжелых и легких дырок. В

отсутствия магнитного поля такая трансформация приводит к существенно непараболической зависимости энергии от величины продольного импульса q , т. е. от величины кинетической энергии дырок в плоскости слоев гетероструктуры. Приложенное перпендикулярно слоям магнитное поле квантует эту энергию, что также приводит к сильной взаимной трансформации носителей и существенно нелинейной зависимости энергии размерного квантования дырок от напряженности магнитного поля.

6. Спектр в сверхрешетках с несимметричными треугольными ямами

В последнее время был разработан метод выращивания гетероструктур путем послойного изменения состава твердого раствора. Получаемые с помощью этого метода структуры хорошо описываются моделью потенциала в виде несимметричной треугольной ямы. При этом толщины выращиваемых таким образом треугольных ям достаточно невелики (200–400 Å), что позволяет рассматривать эффекты размерного квантования в таких структурах [10,11].

В настоящей работе мы рассмотрим сверхрешетку на основе $Al_xGa_{1-x}As$, состоящую из несимметричных треугольных квантовых ям шириной w_1 и прямоугольных барьеров толщиной $(d - w_1)$, где d — период сверхрешетки (см. рис. 5). Для расчета спектра носителей в таких сверхрешетках воспользуемся методом плоских волн. В качестве многозонной модели используем модель Кейна (см. (10)–(11)). Согласно изложенной выше схеме метода плоских волн, форма потенциала сверхрешетки входит в систему уравнений (7) лишь в виде фурье-компонент (см. (8)–(9)). Коэффициенты разложения Фурье для потенциала с треугольными ямами легко вычисляются аналитически. Следовательно, схема расчета спектра носителей при этом такая же, как и в случае прямоугольной формы потенциала.

Как известно, в несимметричных гетероструктурах на основе полупроводников с центром инверсии происходит спиновое расщепление спектра носителей. Это расщепление может проявляться в процессах спиновой релаксации, в магнитных и фотогальванических явлениях [22]. В работе [23] аналитически исследовалось расщепление уровней размерного квантования электронов и дырок. При этом в [23] для электронов и легких дырок рассматривалось линейное по продольному импульсу q расщепление, имеющее место лишь при малых q , а для тяжелых дырок — кубическое по q расщепление при малых q . В [23] рассматривалось также расщепление уровней тяжелых дырок в пределе больших импульсов q . При этом в [23] из рассмотрения фактически исключалась та область значений q , в которой спиновое расщепление

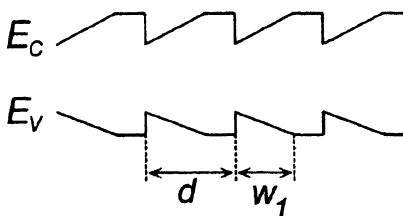


Рис. 5. Схематическое изображение зонной диаграммы сверхрешетки с периодом d , состоящей из несимметричных треугольных квантовых ям шириной w_1 и прямоугольных барьеров.

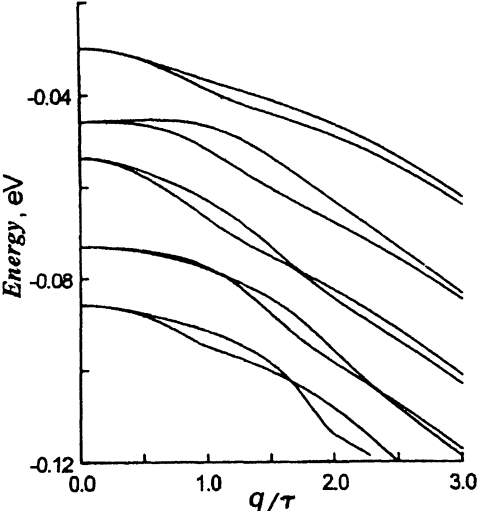


Рис. 6. Спектр дырок в зависимости от продольной компоненты импульса q в сверхрешетке с периодом $d = 320 \text{ \AA}$ на основе $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$, состоящей из несимметричных треугольных ям толщиной $w_1 = 220 \text{ \AA}$ (см. рис. 5). Максимальная концентрация Al в области прямоугольного барьера есть $x = 0.3$. Энергия отсчитывается от края валентной зоны GaAs (т.е. от дна треугольной ямы).

уровней является максимальным (см. рис. 6). Кроме того, в [23] фактически не учитывалось смешивание состояний легких дырок, которое существенно для спинового расщепления. Учет этого смешивания, также как расчет уровней размерного квантования при произвольных значениях продольного импульса q с учетом спинового расщепления, крайне сложен аналитически (в том числе, в рамках подхода, используемого в [23]) и, следовательно, требует численного расчета. Предлагаемый в настоящей работе метод слабой связи позволяет выполнить такой численный расчет.

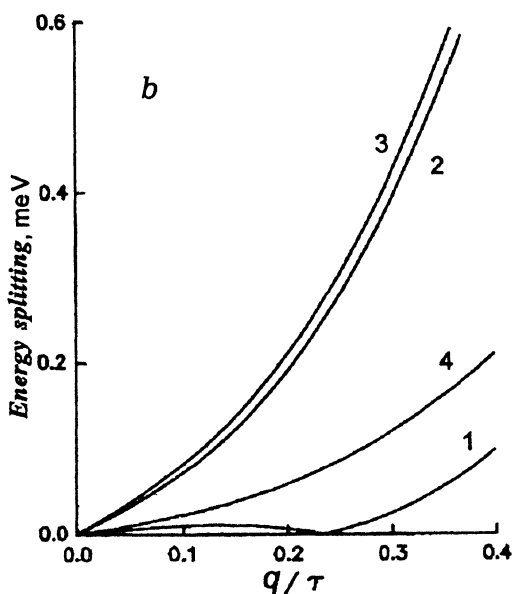
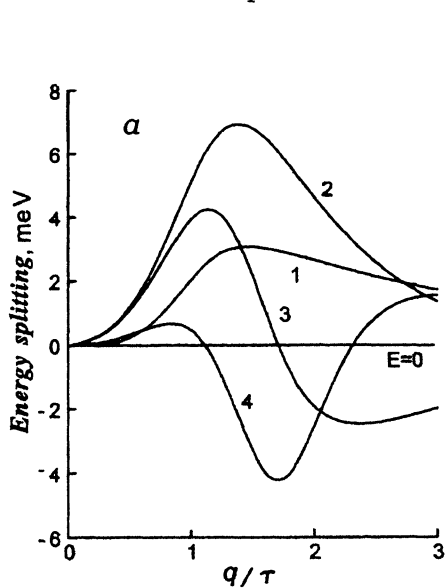


Рис. 7. *a* — спиновое расщепление представленного на рис. 6 спектра дырок, цифрами обозначены номера уровней размерного квантования дырок, горизонтальная линия соответствует нулевой энергии расщепления $E = 0$; *b* — расщепление при малых значениях q .

На рис. 6 представлен спектр дырок в сверхрешетке с несимметричными треугольными квантовыми ямами, рассчитанный с помощью предлагаемого в настоящей работе метода. Обращает на себя внимание значительное спиновое расщепление уровней размерного квантования, которое оказывается порядка расстояния между самими уровнями. На рис. 7 представлена зависимость этого расщепления от продольного импульса q .

Из анализа проделанных численных расчетов спектра носителей в сверхрешетках с несимметричными треугольными ямами на основе GaAs/AlGaAs мы можем сделать следующие выводы. Во-первых, для треугольных ям с толщинами 150–400 Å та область значений продольного импульса q , в которой особенно существенно смешивание состояний легких и тяжелых дырок (т.е. происходит заметное изменение продольной эффективной массы), расположена близко к области, в которой происходит наибольшее спиновое расщепление уровней размерного квантования дырок. Следовательно, учет смешивания легких и тяжелых дырок важен для расчета спинового расщепления. Во-вторых, линейное по q расщепление для уровней легких дырок, рассмотренное в [23], имеет место лишь при очень малых значениях $q \ll [2m_{lh}U_v/(\hbar^2w_1)]^{1/3}$ (см. рис. 7). При этом в области наибольшего расщепления зависимость от q существенно нелинейна. В-третьих, при определенных значениях продольного импульса q спиновое расщепление уровней отсутствует, что, по-видимому, связано с возможностью компенсации при определенных q вкладов в спиновое расщепление от ближайших уровней размерного квантования и с сильным влиянием на спиновое расщепление смешивания состояний легких и тяжелых дырок при их взаимодействии с гетерограницей и линейным потенциалом треугольной ямы.

7. Заключение

В настоящей работе предложен метод слабой связи для расчета спектра и волновых функций носителей в полупроводниковых гетероструктурах. Преимуществом данного метода является то, что он не требует знания граничных условий для компонент огибающих волновых функций; кроме того, данный метод позволяет рассчитывать спектр и волновые функции носителей в гетероструктурах с произвольной формой потенциала, а также в присутствии магнитного поля, перпендикулярного плоскости сверхрешетки.

Исследован механизм формирования спектра дырок в сверхрешетках, состоящих из ультратонкого слоя одного и толстого слоя другого материала. Показано, что в таких сверхрешетках состояния носителей формируются из нескольких плоских волн объемного материала, т.е. хорошо описываются в рамках приближения слабой связи.

Рассчитан и исследован спектр дырок в сверхрешетках с несимметричными треугольными ямами и исследовано спиновое расщепление уровней размерного квантования в них. Показано, что:

- 1) спиновое расщепление уровней размерного квантования дырок велико и порядка расстояния между самими уровнями;
- 2) смешивание состояний легких и тяжелых дырок при их взаимодействии с потенциалом гетероструктуры оказывает сильное влияние на спиновое расщепление уровней размерного квантования дырок;

3) зависимость спинового расщепления дырок от продольного импульса существенно нелинейна;

4) при определенных значениях продольного импульса расщепление уровней дырок равно нулю, т. е. расщепление «меняет знак».

Предлагаемый метод расчета спектра и волновых функций в двумерных гетероструктурах легко может быть обобщен на случай структур более низкой размерности, таких как квантовые проволоки и квантовые точки.

Работа была частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (грант 93-02-3199) и INTAS (грант 94-1172). Работа А.Д. Андреева поддержана стипендией INTAS (грант 93-2492) и проводится в рамках программы исследований Международного центра фундаментальной физики в Москве.

Список литературы

- [1] G. Bastard. *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures* (Les Editors de Physique, Les Ulis, Cedex, 1988).
- [2] M. Altarelli. In: *Heterojunctions and Semiconductor Superlattices*, ed. by G. Allan, G. Bastard, N. Voccaro, M. Lannoo, M. Voos (Springer, Berlin, 1986) p. 12.
- [3] M. Altarelli, U. Ekenberg, A. Fasolino. *Phys. Rev. B*, **32**, 5138 (1988).
- [4] Л.Г. Герчиков, Г.В. Рожнов, А.В. Субашиев. *ЖЭТФ*, **101**, 212 (1991).
- [5] R. Winkler, U. Possler. *Phys. Rev. B*, **48**, 8919 (1993).
- [6] A.T. Menev, Besire Gonul, E.P. O'Reilly. *Phys. Rev. B*, **50**, 10893 (1994).
- [7] Н. Ашкрофт, Н. Мермин. *Физика твердого тела* (М., Мир, 1979).
- [8] J.N. Schulman, Yia-Chung Chang. *Phys. Rev. B*, **31**, 2056 (1985).
- [9] Yia-Chung Chang, J.N. Schulman. *Phys. Rev. B*, **31**, 2069 (1985).
- [10] F.C. Lin, W.S. Chi, Y.S. Huang, H. Qiang, F.H. Pollak, D.L. Mathine, G.N. Maracas. *Semicond. Sci. Technol.*, **10**, 1009 (1995).
- [11] D.L. Mathine, G.N. Maracas, D.S. Gerber, R. Droopad, R.J. Graham, M.R. McGartney. *J. Appl. Phys.*, **75**, 4551 (1994).
- [12] G.D. Sanders, K.K. Bajaj. *J. Appl. Phys.*, **68**, 5348 (1990).
- [13] J.G. Cody, D.L. Mathine, R. Droopad, G.N. Maracas, R. Rajesh, R.W. Garpenter. *J. Vac. Sci. Technol.*, **B12**, 1075 (1994).
- [14] В.П. Дьяконов. *Справочник по алгоритмам и программам на языке бейсик для персональных ЭВМ* (М., Наука, 1986) с. 120.
- [15] Е.О. Кане. *J. Phys. Chem. Sol.*, **1**, 249 (1957).
- [16] Р.А. Сурис. *ФТП*, **20**, 2008 (1986).
- [17] А.В. Сокольский, Р.А. Сурис. *ФТП*, **21**, 866 (1987).
- [18] М.Р. Mikhailova, A.N. Titkov. *Semicond. Sci. Technol.*, **9**, 347 (1994).
- [19] C.R. Pidgeon, R.N. Brown. *Phys. Rev.*, **146**, 575 (1966).
- [20] F. Ancilotto, A. Fasolino, J.C. Maan. *Phys. Rev. B*, **38**, 1788 (1988).
- [21] S.L. Woag, R.J. Warburton, R.L. Nicholas, N.J. Nason, P.J. Walker. *Phys. Rev. B*, **49**, 11210 (1994).
- [22] Г.Е. Пикус, В.А. Марущак, А.Н. Титков. *ФТП*, **22**, 185 (1988).
- [23] Л.Г. Герчиков, А.В. Субашиев. *ФТП*, **26**, 131 (1992).

Редактор Т.А. Полянская

Weak binding approximation for calculating the carrier spectrum in heterostructures

A.D. Andreev, R.A. Suris

A.F. Ioffe Physicotechnical Institute, Russian Academy of Sciences,
194021 St. Petersburg, Russia

A method based on the weak binding approximation is proposed in the present paper for calculating the energy spectrum and the carrier wave functions in semiconductor heterostructures. It is shown that this method can be effectively used for a great of heterostructures both in the absence and in the presence of the external magnetic field oriented along the heterostructure axis. Peculiarities of the hole spectrum in superlattices with a thin layer of one semiconductor and a thick layer of another semiconductor are studied. It is shown that in such superlattices the hole wave function is a superposition of several bulk states of light and heavy holes having regard to their mixing at the heteroboundary. Hole spectrum in superlattices with asymmetric triangle wells is calculated and analyzed.
