

ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ И ЭФФЕКТИВНАЯ МАССА ЭЛЕКТРОНОВ В СВЕРХРЕШЕТКЕ

Гашимзаде Н. Ф., Ивченко Е. Л.

В модели Кронига—Пенни при граничных условиях общего вида выведено дисперсионное уравнение для электрона в полупроводниковой сверхрешетке. Проанализировано, как выбор граничных условий влияет на энергию и эффективную массу электрона в точках экстремума мини-зонного спектра.

Введение. При расчете мини-зонного спектра электронов в полупроводниковой композиционной сверхрешетке широко применяется модель Кронига—Пенни. В классической постановке задачи Кронига—Пенни (см., например, [1, § 55]) граничными условиями, накладываемыми на волновую функцию электрона $\psi(\mathbf{r})$, служат условия непрерывности ψ и $\partial\psi/\partial\mathbf{r}$ в точках разрыва потенциала. В аналогичной задаче для электрона в гетероструктуре, решаемой в приближении эффективной массы, граничные условия (ГУ) накладываются на огибающую волновой функции электрона. Вид этих условий неоднозначен и зависит от выбора композиционных материалов и свойств гетерограницы. Наиболее употребительными являются условия [2]

$$\psi_A = \psi_B, \quad \frac{1}{m_A} \left(\frac{\partial\psi}{\partial z} \right)_A = \frac{1}{m_B} \left(\frac{\partial\psi}{\partial z} \right)_B, \quad (1)$$

где $m_{A,B}$ — эффективная масса электрона, индексами A и B обозначены материалы по обе стороны гетерограницы. В недавно опубликованной работе [3] представлено микроскопическое обоснование применимости ГУ (1) для сверхрешетки $\text{GaAs}/\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

В общем случае огибающая и ее производная по одну сторону границы сшиваются с линейными комбинациями ψ и $\partial\psi/\partial z$ по другую сторону:

$$\begin{bmatrix} \psi_A \\ \varphi_A \end{bmatrix} = \hat{T}_{AB} \begin{bmatrix} \psi_B \\ \varphi_B \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} t_{11} & t_{12} \\ t_{21} & t_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_B \\ \varphi_B \end{bmatrix}. \quad (2)$$

Здесь вместо производных $(\partial\psi/\partial z)_{A,B}$ введены функции

$$\varphi_A = l \left(\frac{\partial\psi}{\partial z} \right)_A, \quad \varphi_B = l \frac{m_A}{m_B} \left(\frac{\partial\psi}{\partial z} \right)_B, \quad (3)$$

l — произвольно выбранная и фиксированная длина. При такой форме ГУ все четыре коэффициента t_{ij} безразмерны. С учетом сохранения потока на границе эти коэффициенты удовлетворяют соотношению

$$\text{Det } \hat{T}_{AB} = t_{11}t_{22} - t_{12}t_{21} = 1.$$

Символ \hat{T}_{AB} означает матрицу перехода на границе типа AB (по отношению к оси z слой B расположен правее слоя A). Матрица \hat{T}_{BA} для границы типа BA отличается от \hat{T}_{AB} знаком недиагональных элементов. ГУ (1) получаются из (2) при $t_{11}=t_{22}=1$, $t_{12}=t_{21}=0$. С учетом того, что в ряде работ обсуждалась воз-

возможность отличных от (1) ГУ [3-7] (см. также цитируемую в [3] литературу), было интересно проанализировать, как влияет выбор матрицы перехода \hat{T}_{AB} на мини-зонную структуру электрона в сверхрешетке. С этой целью в данной работе дисперсионное уравнение для электронов выведено для ГУ общего вида (2) и найдена зависимость от t_{ij} энергии и эффективной массы электрона в точках экстремума мини-зонного спектра.

1. Дисперсионное уравнение

Рассмотрим периодическую гетероструктуру, составленную из чередующихся слоев A (квантовая яма) и B (барьер) толщиной a и b соответственно. Решение уравнения Шредингера для электронов выведено для ГУ общего вида (2) и найдена зависимость от t_{ij} энергии и эффективной массы электрона в точках экстремума мини-зонного спектра.

$$\psi(\mathbf{r}) = e^{i(q_x x + q_y y)} \psi(z), \quad \psi(z+d) = e^{iKd} \psi(z), \quad (4)$$

где период $d = a + b$.

Пары значений функций ψ_i, φ_i на правой и левой внутренних границах слоя $i = A, B$ связаны между собой матрицами перехода

$$\hat{T}_A = \begin{bmatrix} \cos ka & -\alpha^{-1} \sin ka \\ \alpha \sin ka & \cos ka \end{bmatrix}, \quad (5)$$

$$\hat{T}_B = \begin{bmatrix} \text{ch } \chi b & -\beta^{-1} \text{sh } \chi b \\ -\beta \text{sh } \chi b & \text{ch } \chi b \end{bmatrix}.$$

Здесь

$$k = \left(\frac{2m_A}{\hbar^2} E - q^2 \right)^{1/2}, \quad \alpha = \left[\frac{2m_B}{\hbar^2} (V - E) + q^2 \right]^{1/2}, \quad (6)$$

$$\alpha = lk, \quad \beta = \alpha \gamma, \quad \gamma = \left(\frac{m_A \chi}{m_B k} \right),$$

E — энергия электрона, отсчитанная от дна квантовой ямы, V — потенциальный барьер для электрона на гетерогранице, $q^2 = q_x^2 + q_y^2$. Для блоховских решений матрица перехода через период

$$\hat{M} = \hat{T}_{AB} \hat{T}_B \hat{T}_{BA} \hat{T}_A$$

удовлетворяет уравнению

$$e^{-iKd} = \hat{M},$$

откуда с учетом унитарности вещественной матрицы \hat{M} получаем дисперсионное уравнение

$$2 \cos K(a+b) = M_{11} + M_{22}. \quad (7)$$

Это уравнение можно представить в виде

$$1 - \cos K(a+b) = F \equiv 1/2 \sin ka \text{sh } \chi b f g, \quad (8)$$

где

$$f = (t_{11} - t_{12} \beta \text{th } \Phi_b) \text{tg } \Phi_a - \gamma (t_{22} \text{th } \Phi_b - t_{21} \beta^{-1}), \quad (9)$$

$$g = \gamma^{-1} (t_{11} - t_{12} \beta \text{cth } \Phi_b) \text{ctg } \Phi_a + t_{22} \text{cth } \Phi_b - t_{21} \beta^{-1},$$

$\Phi_a = ka/2$, $\Phi_b = \chi b/2$. Это представление удобно использовать для анализа электронного спектра при малых K . В частности, из (8) следует, что энергия электрона при $K=0$ удовлетворяет одному из уравнений

$$f = 0 \text{ или } g = 0 \quad (10)$$

для решений $\psi(\mathbf{r})$, соответственно четных и нечетных по отношению к отражению в плоскости (x, y) , проходящей через центр ямы или барьера. Для анализа спектра вблизи $K = \pm \pi/(a+b)$ вместо (8) удобнее пользоваться эквивалентным ему уравнением

$$1 + \cos K(a+b) = \frac{1}{2} \sin ka \operatorname{sh} \chi b \hat{f} \hat{g}, \quad (11)$$

где

$$\begin{aligned} \hat{f} &= -(t_{11} - t_{12} \beta \operatorname{cth} \Phi_b) \operatorname{tg} \Phi_a + \eta (t_{22} \operatorname{cth} \Phi_b - t_{21} \beta^{-1}), \\ \hat{g} &= \eta^{-1} (t_{11} - t_{12} \beta \operatorname{th} \Phi_b) \operatorname{ctg} \Phi_a + t_{22} \operatorname{th} \Phi_b - t_{21} \beta^{-1}. \end{aligned}$$

Уравнение $\hat{f}=0$ определяет энергию электрона на границе зоны Бриллюэна в состоянии, четном при отражении относительно центра ямы или нечетном при отражении относительно центра барьера. Уравнение $\hat{g}=0$ отвечает состояниям на границе зоны Бриллюэна противоположной четности.

2. Э ф ф е к т и в н а я м а с с а

Разложим энергию электрона E_{nQ} в n -й мини-зоне по степеням волнового вектора $Q=(q_x, q_y, K)$. С точностью до членов второго порядка

$$E_{nQ} = E_n^0 + \frac{\hbar^2 K^2}{2m_{\parallel}} + \frac{\hbar^2 q^2}{2m_{\perp}}. \quad (12)$$

Для нахождения поперечной массы m_{\perp} нужно усреднить обратную эффективную массу электрона:

$$m_{\perp}^{-1} = \langle n | m^{-1} | n \rangle = \int (\psi_n^0)^2 [m_A^{-1} + (m_B^{-1} - m_A^{-1}) \theta_B(z)] dz, \quad (13)$$

где $\theta_B=0$ в ямах и $\theta_B=1$ в барьерах, ψ_n^0 — блоховская функция при $Q=0$. Согласно теории возмущений, при изменении потенциального барьера V на δV энергия E_n^0 в первом порядке по δV меняется на величину

$$\delta E_n^0 = \delta V \langle n | \theta_B | n \rangle.$$

Поэтому (13) можно переписать в виде

$$\frac{1}{m_{\perp}} = \frac{1}{m_A} + \left(\frac{1}{m_B} - \frac{1}{m_A} \right) \frac{dE_n^0}{dV}. \quad (14)$$

В [8] это соотношение приведено без вывода.

Для нахождения продольной эффективной массы m_{\parallel} разложим левую часть (8) по степеням $K(a+b)$, а правую часть (8) — по степеням $E-E_n^0$. В результате получим

$$m_{\parallel} = \left(\frac{dF}{dE} \right)_n \frac{\hbar^2}{(a+b)^2}, \quad (15)$$

где индекс n означает производную при $E=E_n^0$. При вычислении $(dF/dE)_n$ достаточно в правой части (8) продифференцировать \hat{f} или \hat{g} [см. (10)]. Приведем конечную формулу для продольной эффективной массы

$$m_{\parallel} = \pm \hbar \frac{m_A \operatorname{sh} \chi b}{k(a+b) C_a^2}, \quad (16)$$

где

$$h = \eta (t_{22}^2 + \alpha^2 t_{12}^2) + \eta^{-1} [t_{11}^2 + (t_{21}/\alpha)^2] - 2(\alpha t_{11} t_{12} + \alpha^{-1} t_{21} t_{22}) \operatorname{cth} \chi b,$$

$$C_a^2 = 2(a+b) \left\{ a \left(1 \pm \frac{\sin ka}{ka} \right) + b \left(\frac{\operatorname{sh} \chi b}{\chi b} \pm 1 \right) \frac{1 \pm \cos ka}{\operatorname{ch} \chi b \pm 1} \left[t_{11} - t_{12} \beta \left(\operatorname{th} \frac{\chi b}{2} \right)^{\pm 1} \right] \right\}^{-1},$$

верхний и нижний знаки относятся соответственно к четным и нечетным состояниям, величины k , χ и η определяются при $E=E_n^0$. Эффективные массы электрона в точках $(0, 0, \pm \pi/d)$ находятся аналогично.

3. Р е з у л ь т а т ы р а с ч е т а и о б с у ж д е н и е

Для изучения зависимости параметров нижней мини-зоны s_1 от вида ГУ рассмотрены два типа однопараметрических матриц \hat{T}_{AB} :

$$t_{11} = 1 + \varepsilon, \quad t_{22} = 1 - \varepsilon, \quad t_{21} = -t_{12} = \varepsilon, \quad (17a)$$

$$t_{22} = t_{11}^{-1} = 1 + \varepsilon', \quad t_{12} = t_{21} = 0. \quad (17b)$$

При $\varepsilon, \varepsilon' = 0$ ГУ (17) переходят в (1).

На рис. 1 изображены зависимости $E_1^0(\varepsilon)$ и $m_{\parallel}(\varepsilon)$, рассчитанные при «недиагональных» ГУ (17a) для сверхрешеток с тремя различными периодами. Расчет проводился при $m_A = 0.067m_0$, $m_B = 1.43m_A$ (m_0 — масса свободного электрона), $V = 249$ мэВ и при равной толщине слоев $a = b$. Элементарная длина l в (3) полагалась равной $(\hbar^2/2m_A V)^{1/2}$. При некотором значении $\varepsilon = \varepsilon_{cr}$ энергия E_1^0 обращается в нуль, при $|\varepsilon| > \varepsilon_{cr}$ эта энергия отрицательна, а величина k мнимая. Значение ε_{cr} находится из условия [см. (9)]

$$(t_{22} \operatorname{th} \frac{\chi b}{2} - t_{21} \beta^{-1})_{E=0} = 0,$$

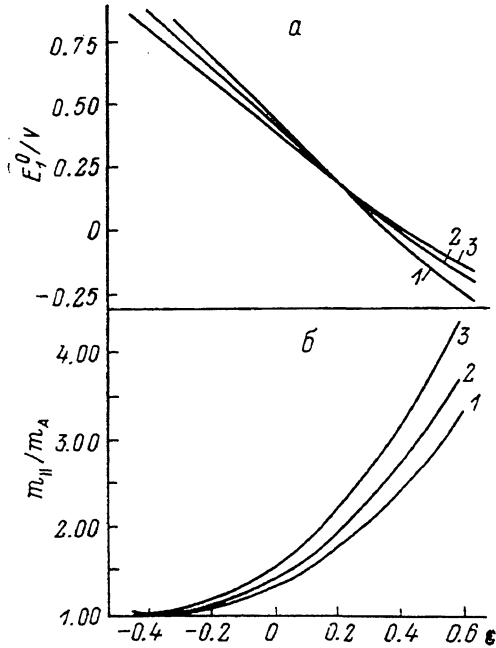


Рис. 1. Зависимость энергии E_1^0 (a) и продольной эффективной массы m_{\parallel} (б) электрона на дне нижней мини-зоны от безразмерного параметра ε в граничных условиях (17a).

$a, \text{ \AA}: 1 - 40, 2 - 50, 3 - 60.$

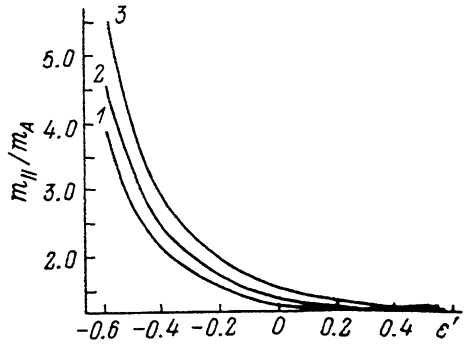


Рис. 2. Зависимость продольной эффективной массы электрона на дне нижней мини-зоны от безразмерного параметра $\varepsilon' = (t_{22}/t_{11})^{1/2}$ (1) при диагональных граничных условиях (17b).

$a, \text{ \AA}: 1 - 40, 2 - 50, 3 - 60.$

откуда получаем

$$\varepsilon_{cr} = \left[1 + \sqrt{\frac{m_B}{m_A}} \operatorname{cth} \left(\sqrt{\frac{m_B}{m_A}} \frac{b}{2l} \right) \right]^{-1}. \quad (18)$$

Для одиночной квантовой ямы ($b \rightarrow \infty$)

$$\varepsilon_{cr} = \left(1 + \sqrt{\frac{m_B}{m_A}} \right)^{-1}.$$

На рис. 2 представлена зависимость $m_{\parallel}(\varepsilon')$, рассчитанная при диагональных ГУ (17b). Заметим, что уравнение (8) в этом случае можно привести к дисперсионному уравнению для ГУ (1) путем следующей замены:

$$m_B \rightarrow \tilde{m}_B = m_B t_{11}^4, \quad b \rightarrow \tilde{b} = b/l_{11}^2,$$

$$K \rightarrow \tilde{K} = K \frac{a+b}{a+b}.$$

Отсюда получаем соотношения

$$\begin{aligned} E_1^0(\varepsilon', m_B, b) &= E_1^0(0, \tilde{m}_B, \tilde{b}), \\ m_{\parallel}(\varepsilon', m_B, b) &= m_{\parallel}(0, \tilde{m}_B, \tilde{b}), \end{aligned} \quad (19)$$

связывающие зонные параметры в сверхрешетках с ГУ (17b) и (1).

Таким образом, из экспериментально определенных значений E_* и $m_{||}$ можно сделать вывод о виде граничных условий, накладываемых на гетерогранице на огибающую волновой функции электрона.

Список литературы

- [1] Лифшиц Е. М., Питаевский Л. П. Статистическая физика. Ч. 2. М., 1978. 448 с.
- [2] Bastard G. // Phys. Rev. 1981. V. B24. N 10. P. 5693—5697.
- [3] Ando T., Wakahara S., Akera H. // Phys. Rev. 1989. V. B40. N 17. P. 11609—11618.
- [4] Morrow R. A. // Phys. Rev. 1987. V. B35. N 15. P. 8074—8079.
- [5] Trzeciakowski W. // Phys. Rev. 1988. V. B38. N 6. P. 4322—4325. N 17. P. 12493—12507.
- [6] Fu Y., Chao K. A. // Phys. Rev. 1989. V. B40. N 12. P. 8349—8356.
- [7] Гашимзаде Н. Ф., Ивченко Е. Л., Кособукин В. А. // ФТП. 1989. Т. 23. В. 5. С. 839—844.
- [8] Ivchenko E. L., Kochereshko V. P., Kop'ev P. S., Kosobukin V. A., Uraltsev I. N., Yakovlev D. R. // Sol. St. Commun. 1989. V. 70. N 5. P. 529—534.

Физико-технический институт
им. А. Ф. Иоффе АН СССР
Ленинград

Получена 16.10.1990
Принята к печати 24.10.1990
