

Многоканальное рассеяние носителей заряда на гетероструктурах с квантовыми ямами

© В.И. Галиев, А.Н. Круглов, А.Ф. Полупанов[¶], Е.М. Голдис*, Т.Л. Тансли*

Институт радиотехники и электроники Российской академии наук,
101999 Москва, Россия

*Semiconductor Science and Technology Laboratories, Macquarie University,
North Ryde 2109 NSW, Australia

(Получена 9 апреля 2001 г. Принята к печати 14 ноября 2001 г.)

Развит эффективный численно-аналитический метод расчета состояний непрерывного спектра в системах с квантовыми ямами с произвольным профилем потенциала, описываемых системой связанных уравнений Шредингера, таких как состояния дырок в полупроводниковых квантовых ямах. Состояния сплошного спектра находятся точно, в постановке, соответствующей задаче рассеяния. Построены состояния рассеяния (*in/out*-решения) и *S*-матрица в случае многоканального рассеяния в одномерных системах с квантовыми ямами, получены и проанализированы их свойства симметрии. Метод применен для исследования рассеяния дырок на квантовых ямах GaInAs-InGaAsP с напряженными слоями. Вычислены зависимости коэффициентов прохождения и отражения дырок, а также времен задержки от энергии падающей дырки для различных значений параметров структур и величины компоненты импульса, параллельной гетерограницам. При энергиях, при которых закрыт канал с превращением тяжелой дырки в распространяющуюся легкую, рассеяние тяжелой дырки на квантовой яме имеет резонансный характер.

1. Введение

Одним из наиболее эффективных методов исследования электронного спектра и оптических свойств полупроводниковых гетероструктур с квантовыми ямами (КЯ) является метод огибающей функции, основанный на приближении эффективной массы. Он хорошо описывает электронные и дырочные подзоны вблизи центра зоны Бриллюэна и особенно удобен в случаях, когда необходимо учитывать эффекты внутренних напряжений, связанных с рассогласованием постоянных решетки или внешних возмущений, таких как одноосные деформации, магнитные и электрические поля. В рамках приближения эффективной массы задача вычисления энергий и волновых функций носителей заряда в системах с КЯ сводится к решению, вообще говоря, системы связанных уравнений Шредингера для огибающих функций. В [1] нами был развит эффективный численно-аналитический метод расчета размерно-квантованных состояний в системах с квантовыми ямами с произвольным профилем потенциала, описываемых связанными уравнениями Шредингера, таких как состояния дырок в полупроводниковых КЯ. В настоящей работе, с использованием результатов работ [1] и [2], этот метод обобщен на случай состояний непрерывного спектра. Состояния сплошного спектра находятся непосредственно в постановке, соответствующей задаче рассеяния. Строятся состояния рассеяния (*in/out*-решения) и *S*-матрица, описывающая многоканальное рассеяние в системах с КЯ, и детально анализируются их свойства симметрии. Метод применен для исследования рассеяния дырок на квантовых ямах GaInAs-InGaAsP с напряженными слоями.

2. Общая формулировка метода

Рассмотрим, для определенности, случай одиночной квантовой ямы (барьера) с профилем потенциала общего вида $V(z)$, где z — ось координат, перпендикулярная слоям в структуре. Считаем, что яма расположена между точками $z = 0$ и $z = d$. Потенциал $V(z)$ нарушает трансляционную симметрию вдоль оси z , но компоненты импульса, параллельные поверхностям раздела, остаются „хорошими“ квантовыми числами. Тогда внутри области, где расположена яма, имеем следующую систему уравнений Шредингера, которая, как легко увидеть, есть общий вид уравнений для огибающих функций дырки, получаемых после подстановки $k_z \rightarrow -id/dz$ в гамильтониан приближения эффективной массы:

$$H\Psi = \{a \cdot d^2/dz^2 + b \cdot d/dz + c + V(z)\}\Psi(z) = E\Psi(z). \quad (1)$$

Здесь a, b, c — это вещественные, не зависящие от z , $n \times n$ матрицы, $\Psi(z)$ — n -компонентная волновая функция, число n определяется числом учитываемых зон, а компоненты матриц a, b и c зависят от параметров валентной зоны и компонент импульса, параллельных поверхностям раздела.

Удобно представить (1) в форме уравнения 1-го порядка, заменяя $\Psi(z)$ на $2n$ -компонентную функцию $y(z) = \begin{pmatrix} \Psi(z) \\ d\Psi(z)/dz \end{pmatrix}$:

$$dy(z)/dz = A(z)y(z), \quad (2)$$

где $A(z)$ — это $2n \times 2n$ -матричная функция. Мы предполагаем далее, что потенциал $V(z)$ есть аналитическая функция внутри области ямы и что радиус сходимости степенного разложения $V(z)$ превосходит d .

[¶] E-mail: sashap@mail.cplire.ru

Очевидно, что если ряд $A(z) = A_0 + A_1z + A_2z^2 + \dots$ сходится в окрестности точки $z = 0$, то и следующий ряд для решений

$$y(z) = \sum_{k=0}^{\infty} y_k z^k \quad (3)$$

также сходится в этой же окрестности. Здесь A_k и y_k — это не зависящие от z $2n \times 2n$ -матрицы и $2n$ -векторы соответственно. Подставляя (3) в (2), получаем следующие рекуррентные соотношения для y_k :

$$(k+1)y_{k+1} = \sum_{l=0}^k A_l y_{k-l}, \quad k = 0, 1, \dots, \quad (4)$$

где $y_0 = y(0)$. Поскольку потенциал $V(z)$ — аналитическая функция, выражения (3) и (4) дают точные формулы для решений внутри ямы и позволяют вычислять эти решения с любой требуемой точностью, обрывая соответствующие ряды при достаточно большом k , определяем заданной точностью.

Так как вне ямы $V(z) = 0$, то при $z < 0$, $z > d$ решения (2), удовлетворяющие определенным условиям при $z \rightarrow \pm\infty$, легко найти: они есть суперпозиции $2n$ -столбцов (собственных векторов матрицы A_0), умноженных на экспоненциальные функции с комплексными аргументами (собственные значения матрицы A_0). В случае состояний сплошного спектра либо все собственные значения матрицы A_0 — чисто мнимые, либо некоторые из них — с ненулевой действительной частью, а некоторые — чисто мнимые.

При $0 \leq z \leq d$ решения строятся, как описано выше, в виде степенных рядов с использованием рекуррентных соотношений. В точках $z = 0, d$ на решения накладываются определенные граничные условия, например, что $y(z)$ должна быть непрерывна при пересечении поверхностей раздела, или более общие условия, например в случае, если материальные параметры различны в яме и барьере. Для определенности, но без потери общности, рассмотрим далее случай, когда $y(z)$ должна быть непрерывна на гетерограницах.

2.1. Пусть матрица $A_0(E)$ имеет при некотором значении E из сплошного спектра $2n$ собственных значений: $i\kappa_1, \dots, i\kappa_n, -i\kappa_1, \dots, -i\kappa_n$; $\kappa_i > 0, 1 \leq i \leq n$. Определим фундаментальную матрицу решений уравнения (2) при $z \leq 0$ и $z \geq d$ в терминах следующей $2n \times 2n$ -матричной функции:

$$F(z) \equiv (\chi_1 \exp(i\kappa_1 z), \dots, \chi_n \exp(i\kappa_n z), \chi_{n+1} \exp(-i\kappa_1 z), \dots, \chi_{2n} \exp(-i\kappa_n z)). \quad (5)$$

Если λ — это некоторое собственное значение A_0 , то соответствующий собственный вектор имеет вид $\chi = \begin{pmatrix} u \\ \lambda u \end{pmatrix}$, и нам удобно считать, что $u^* u = 1$. Отметим, что если a, b, c, E — вещественные и λ — это собственное значение, то собственными значениями будут также

величины $-\lambda, \bar{\lambda}, -\bar{\lambda}$ (символ $*$ обозначает эрмитово сопряжение, черта над символом — комплексное сопряжение). Полагаем, что собственные векторы, отвечающие комплексно-сопряженным собственным значениям, также являются комплексно-сопряженными. Используя каждый столбец $2n \times 2n$ -матрицы $F(0)$ как „начальный“ столбец y_0 в (4), получаем $2n \times 2n$ матричную функцию $\hat{F}(z)$, которая есть решение уравнения (2) при $0 \leq z \leq d$. Вычислив эту матричную функцию в точке $z = d$, мы получим $2n \times 2n$ -матрицу $\hat{F}(d)$. Поскольку фундаментальная матрица решений не вырождена, очевидно, что существует некоторая неособая $2n \times 2n$ -матрица Π , такая что $\hat{F}(d) = F(d)\Pi$. Поэтому матрица Π однозначно определена соотношением $\Pi = F^{-1}(d)\hat{F}(d)$. Для нахождения волновой функции, соответствующей дырке в определенной зоне, падающей на яму из левого полупространства (*in*-состояние), нужно решить следующую неоднородную систему линейных алгебраических уравнений:

$$\Pi(e, \xi_-)^T = (\xi_+, 0)^T, \quad (6)$$

где символ „ T “ обозначает транспонирование, ξ_-, ξ_+ — это $2n$ коэффициентов, которые и нужно найти (S -матрица определяется через них, — см. разд. 3 и Приложение), а $e = (0, \dots, 0, 1, 0, \dots, 0)$. Неоднородная система $2n$ линейных уравнений (6) для $2n$ неизвестных коэффициентов ξ_- и ξ_+ всегда может быть решена однозначно. После того как система (6) решена, мы получаем следующие выражения для волновой функции (*in*-волны) при $z \leq 0, 0 \leq z \leq d, z \geq d$ соответственно:

$$F(z)(e, \xi_-)^T, \quad \hat{F}(z)(e, \xi_-)^T, \quad F(z)(\xi_+, 0)^T.$$

Отметим, что нормировка построенного *in*-состояния совпадает с нормировкой падающей плоской волны $\exp(i\kappa_s z)u_s$ (см. Приложение). Построение волновой функции, соответствующей дырке, падающей на яму из правого полупространства, и *out*-состояний абсолютно аналогично.

2.2. Для большей наглядности (но без потери общности) рассмотрим случай матрицы A_0 размером 4×4 , т. е. $n = 2$. Пусть $E_I < E < E_{II}$, где E_I, E_{II} — собственные значения матрицы c , а собственные значения матрицы A_0 равны: $i\kappa, \lambda, -\lambda, -i\kappa$ ($\kappa, \lambda > 0$). Введем определение

$$F(z) \equiv (\chi_1 \exp(i\kappa z), \chi_2 \exp(\lambda z), \chi_3 \exp(-\lambda z), \chi_4 \exp(-i\kappa z)).$$

Как и в предыдущем разделе, получаем: $\hat{F}(d) = F(d)\Pi$. Поэтому матрица Π определена однозначно. Для нахождения волновой функции, соответствующей дырке в определенной зоне, падающей на яму из левого полупространства, решаем следующее уравнение:

$$\Pi(1, \eta_+, 0, \xi_-)^T = (\xi_+, 0, \eta_-, 0)^T. \quad (7)$$

Это есть 4 уравнения для 4 неизвестных ξ_{\pm}, η_{\pm} , где ξ_- и ξ_+ соответствуют отражению и прохождению дырок.

Неоднородная система линейных уравнений (7) для неизвестных коэффициентов ξ и η всегда может быть решена однозначно. Тогда имеем следующие выражения для in -волн при $z \leq 0$, $0 \leq z \leq d$, $z \geq d$ соответственно:

$$F(z)(1, \eta_+, 0, \xi_-)^T, \quad \bar{F}(z)(1, \eta_+, 0, \xi_-)^T, \\ F(z)(\xi_+, 0, \eta_-, 0)^T.$$

3. S-матрица

При данном значении энергии E удобно маркировать in/out -состояния и элементы S -матрицы двойным индексом $\alpha = (s, \tau) \equiv s\tau$, где $s = \pm$ соответственно для частицы, падающей слева направо и справа налево, а τ обозначает тип частицы (например, легкая (L) или тяжелая (H) дырка), причем $-\alpha \equiv -s\tau$. Умножив выражения для волновых функций in -волн на множитель $|2\pi v_\alpha|^{-1/2}$, мы получим их нормированными на $\delta_{\alpha\alpha'}\delta(E - E')$. Компонента S -матрицы для канала $\beta \rightarrow \alpha$ имеет вид (см. Приложение)

$$S_{\alpha\beta} = X_{\alpha\beta}|v_\alpha/v_\beta|^{1/2}, \quad (8)$$

где матрица $X_{\alpha\beta}$ образована из чисел ξ очевидным образом (например, $X_{-H,+H} \equiv \xi_-$), а для групповой скорости имеем $|v_\alpha| = |iu_\alpha^*(2ik_\alpha \cdot a + b)u_\alpha|$.

Зная S -матрицу, можно также найти и время задержки при прохождении ямы для канала $\beta \rightarrow \alpha$. Действительно, если $S_{\alpha\beta} = \rho \cdot e^{i\phi}$, то

$$t_{\text{delay}}(\beta \rightarrow \alpha) = d\phi/dE = -i \frac{d}{dE} \left(\frac{S_{\alpha\beta}}{|S_{\alpha\beta}|} \right) \frac{|S_{\alpha\beta}|}{S_{\alpha\beta}}.$$

Отметим, что эта величина зависит от выбора „калибровки“ (фазы) нормированных собственных векторов матрицы u_α . Далее мы выбираем „калибровку“, когда первая компонента собственного вектора χ_α (или u_α) больше нуля.

Определив S -матрицу, легко вычислить коэффициенты прохождения и отражения дырок:

$$P_{\alpha\beta} = |S_{\alpha\beta}|^2 \\ = \begin{cases} \text{коэффициент прохождения,} & \text{sgn}(\alpha) = \text{sgn}(\beta), \\ \text{коэффициент отражения,} & \text{sgn}(\alpha) = -\text{sgn}(\beta). \end{cases}$$

Важно подчеркнуть, что для вычисления **всех** элементов $S_{\alpha\beta}$ и, следовательно, всех коэффициентов прохождения и отражения достаточно найти только in -решения, соответствующие дыркам, падающим на яму (барьер) из левого полупространства, что следует из соотношения симметрии $S_{\alpha\beta} = S_{-\beta-\alpha}$ и унитарности S -матрицы.

4. Результаты расчетов и обсуждение

В аксиальном приближении гамильтониан Латтинджера, описывающий состояния тяжелых и легких дырок в КЯ с напряженными слоями, может быть представлен

в виде

$$H = \begin{pmatrix} P + Q + \xi + V(z), & R - iS \\ R + iS & P - Q - \xi + V(z) \end{pmatrix}. \quad (9)$$

Здесь $P = \gamma_1 k^2$, $Q = \gamma_2(k_l^2 - 2k_z^2)$, $R = \sqrt{3}/2(\gamma_2 + \gamma_3)k_l^2$, $S = 2\sqrt{3}\gamma_3 k_l k_z$, $k^2 = k_l^2 + k_z^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$, γ_i — параметры Латтинджера валентной зоны, ξ — величина, пропорциональная разности постоянных решетки в материале ямы и барьера (см. [4]). В качестве единиц измерений длины и энергии мы используем здесь соответственно ширину ямы d и $E_d = \hbar^2/2md^2$.

Развитый метод применен для расчета рассеяния дырок на одиночных КЯ в случае $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}$, выращенного на $\text{In}_{1-x}\text{Ga}_x\text{As}_y\text{P}_{1-y}$ с согласованной с InP решеткой, состояния дырок в котором описываются гамильтонианом (9). Величины всех материальных параметров структур взяты из [4]. Вычислены коэффициенты прохождения и отражения дырок, а также времена задержки при прохождении над КЯ как функции надбарьерной энергии падающей дырки для различных значений величины компоненты импульса, параллельной гетерограницам, ширины ямы и состава сплава x (т.е. величины внутренних напряжений из-за рассогласования постоянных решетки). Наиболее интересные результаты расчетов представлены на рис. 1–4. Расчет показал, что в интервале энергий, при которых может распространяться только тяжелая дырка (при ненулевых значениях компоненты импульса, параллельной гетерограницам), т.е. когда закрыт канал с превращением тяжелой дырки в распространяющуюся легкую (см. п. 2.2.), рассеяние дырки имеет резонансный характер. Отметим, что при

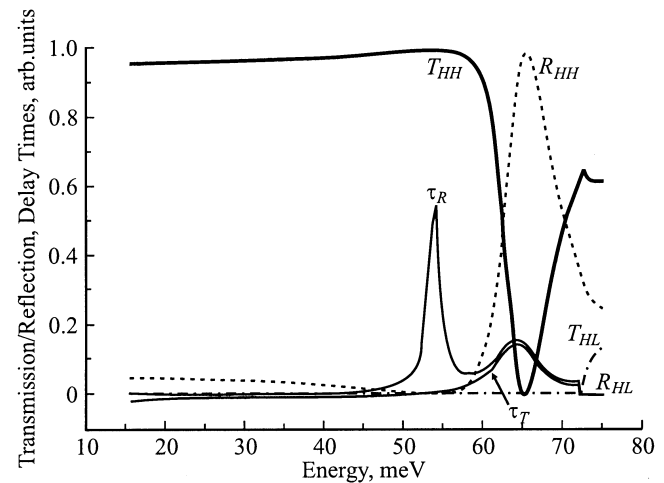


Рис. 1. Коэффициенты прохождения (T_{HH} — без превращения в легкую дырку и T_{HL} — с превращением) и отражения (соответственно R_{HH} и R_{HL}), а также времена задержки (τ_T и τ_R , в произвольных единицах) для тяжелой дырки, падающей на КЯ $\text{Ga}_x\text{In}_{1-x}\text{As}/\text{InGaAsP}$ (InP), $x = 0.468$ (без напряжения решетки), шириной $d = 34 \text{ \AA}$ с компонентой квазиимпульса, параллельной гетерограницам, равной $k_1 = 0.03 \text{ \AA}^{-1}$, как функции надбарьерной энергии (мэВ).

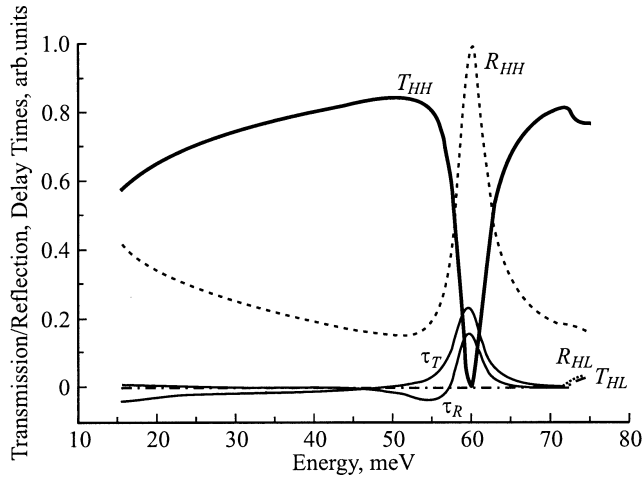


Рис. 2. То же, что и на рис. 1, при $d = 42 \text{ \AA}$.

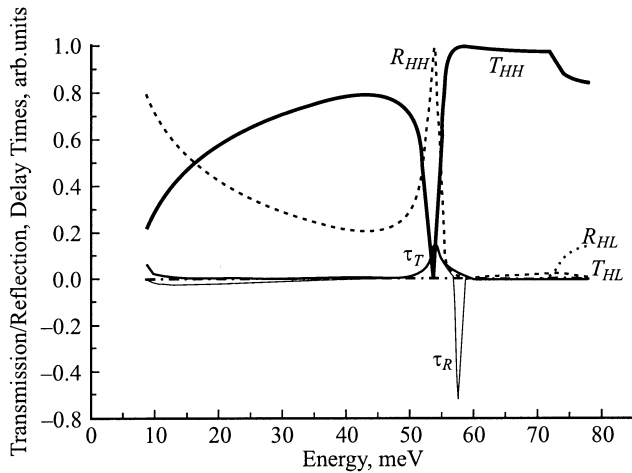


Рис. 3. То же, что и на рис. 1, при $d = 48 \text{ \AA}$.

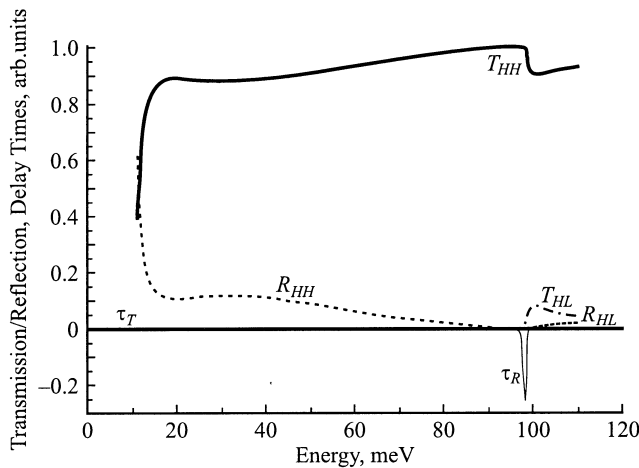


Рис. 4. Случай напряженной решетки ($x = 0.69$, растяжение около 1%), $k = 0.035 \text{ \AA}^{-1}$, $d = 65 \text{ \AA}$.

сжатии КЯ и в отсутствие напряжений, т.е. когда $x \leq 0.468$ [4], качественно результаты зависят только от размеров КЯ: резонансный пик в отражении ($R_{HH} = 1$) имеет место при всех ширинах КЯ, а пик в прохождении ($T_{HH} = 1$) имеется только при некоторых величинах ширины КЯ, причем его положение относительно пика в отражении изменяется с увеличением ширины КЯ. В случае растяжения, т.е. при $x > 0.468$, резонанса в отражении с $R_{HH} = 1$ не наблюдается, однако резонанс с $T_{HH} = 1$ при определенных значениях ширины ямы d может иметь место.

Работа выполнена при частичной финансовой поддержке РФФИ (гранты № 00-02-17429, N 00-01-00361).

Приложение

Состояния рассеяния и S-матрица одномерных систем

Рассмотрим уравнение Шредингера (1) в „много-ямном“ случае, т.е. когда $V(z)$ — это ограниченный кусочно-аналитический потенциал с конечным числом „кусков“, причем

$$V(z) \sim V_1^\pm/z + V_2^\pm/z^2 + \dots, \quad z \rightarrow \pm\infty.$$

Решение $\Psi_{+\tau E}^{in}$ при $z \rightarrow \pm\infty$ имеет вид (in -волна, падающая слева направо)

$$\Psi_{+\tau E}^{in}(z) \sim \begin{cases} e^{ik_{+\tau}z} \cdot u_{+\tau} \\ + \sum_{\tau'} X_{-\tau',+\tau} \cdot e^{ik_{-\tau'}z} \cdot u_{-\tau'}, & z \rightarrow -\infty, \\ \sum_{\tau'} X_{+\tau',+\tau} \cdot e^{ik_{\tau'}z} \cdot u_{+\tau'}, & z \rightarrow +\infty. \end{cases} \quad (\text{П.1})$$

Аналогично для in -волн $\Psi_{-\tau E}^{in}$, падающих справа налево (в случае $V_1^\pm \neq 0$) в показателях экспонент будут присутствовать логарифмические „кулоновские“ фазы (см. [2]), которые мы не выписываем для краткости. Заметим, что если функции $f(z)$ и $g(z)$ удовлетворяют уравнению Шредингера (1) при одной и той же энергии E , то

$$\omega(g;f) \equiv g^* \left(adf/dz + \frac{1}{2}bf \right) - \left(adg/dz + \frac{1}{2}bg \right)^* f = \text{const}. \quad (\text{П.2})$$

Групповую скорость $v_\alpha = idE/d\lambda$ ($\lambda = \lambda_\alpha = ik_\alpha$) можно найти из неявной n -значной функции $E(\lambda)$:

$$\det(a\lambda^2 + b\lambda + c - E) = 0. \quad (\text{П.3})$$

Действительно, нетрудно показать, что если $A(t)$ есть матричная функция t , то

$$\frac{d}{dt} \det A(t) = \text{tr} \left\{ A^{-1}(t) \frac{dA}{dt} \right\} \det A = \text{tr} \left\{ A^\vee(t) \frac{dA}{dt} \right\}, \quad (\text{П.4})$$

где символ \vee означает присоединенную матрицу: $A^\vee \equiv \text{adj} A$. Тогда из (П.4) и формулы для производной неявной функции следует

$$v(\lambda, E) = idE/d\lambda = i \frac{\text{tr}\{h^\vee \cdot (2a\lambda + b)\}}{\text{tr}h^\vee},$$

где $h(\lambda, E) \equiv a\lambda^2 + b\lambda + c - E$. Найдем v при вещественных E и $k_\alpha \equiv \lambda/i$, предполагая невырожденность. Если

$$(-ak_\alpha^2 + ibk_\alpha + c - E)u_\alpha = 0, \quad u_\alpha = u_\alpha(k_\alpha, E), \quad (\text{П.5})$$

то $h^\vee = u_\alpha u_\alpha^* \cdot \text{const}$; тогда, учитывая, что $u_\alpha^* u_\alpha = 1$, имеем

$$v_\alpha = iu_\alpha^*(2ik_\alpha \cdot a + b)u_\alpha; \quad v_\alpha = -v_{-\alpha};$$

$$k_\alpha = k_{-\alpha}; \quad u_\alpha = \bar{u}_{-\alpha}. \quad (\text{П.6})$$

(Заметим, что знак у v_α , равный знаку α по определению, соответствует направлению движения частицы; если $b \neq 0$, то при $k_\alpha > 0$ может быть $v_\alpha < 0$, — этот факт необходимо учитывать при построении состояний рассеяния и S -матрицы). Кроме того, как следует из (П.5), при одинаковой энергии у α и β выполняется

$$v_\alpha \delta_{\alpha\beta} = iu_\beta^* \{i(k_\alpha + k_\beta)a + b\}u_\alpha. \quad (\text{П.7})$$

Если ввести определение

$$S_{\alpha\beta} = S_{\alpha\beta}(E) \equiv X_{\alpha\beta}(E)|v_\alpha/v_\beta|^{1/2},$$

то, как следует из (П.1), (П.6), (П.7) и соотношения (П.2) для функций $\Psi_{\alpha E}^{in}$, $\Psi_{\beta E}^{in}$, мы получаем S -матрицу, которая удовлетворяет условию унитарности:

$$S^* = S^{-1}. \quad (\text{П.8})$$

Если же использовать (П.2) для функций $\Psi_{\alpha E}^{in}$, $\Psi_{\beta E}^{in}$, то получаем условие симметрии (теорема взаимности):

$$S_{\alpha\beta} = S_{-\beta, -\alpha}. \quad (\text{П.9})$$

Теперь можно определить

$$\Psi_{\alpha E}^{out} = \Psi_{-\alpha E}^{in}. \quad (\text{П.10})$$

Умножим in/out -волны на $|2\pi v|^{-1/2}$. Тогда из (П.1), используя формулу Сохоцкого (исключаем энергии, при которых скорость равна нулю), имеем

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{\alpha E}^{in/out} \cdot \Psi_{\beta E'}^{in/out} dz = \delta_{\alpha\beta} \delta(E - E'),$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Psi_{\alpha E}^{out*} \cdot \Psi_{\beta E'}^{in} dz = S_{\alpha\beta} \delta(E - E'),$$

$$\Psi_{\alpha E}^{out} = \sum_{\beta} \Psi_{\beta E}^{in} (S^{-1})_{\beta\alpha}. \quad (\text{П.11})$$

Отметим, что соотношения (П.2), (П.8)–(П.11) останутся справедливыми, если в некоторых промежуточных точках между $-\infty$ и ∞ допустить разрывы в a, b, c, Ψ , совместимые с самосопряженностью гамильтониана. Эти общие свойства, как нетрудно показать, справедливы и для радиальных матричных гамильтонианов [2] (в этом случае const в (П.2) есть нуль из-за самосопряженности радиального гамильтониана). Следует заметить, что n -компонентная задача на $(-\infty, +\infty)$ сводится к $2n$ -компонентной задаче на $(0, \infty)$, т.е. к системе радиальных уравнений Шредингера (см. [2]).

В качестве примера приведем формулы для in -решений и S -матрицы в случае $n = 1$ для гамильтониана

$$H = -d^2/dz^2 + V(z), \quad V(z) = \begin{cases} 0, & z < 0, \\ 1, & z \geq 0. \end{cases}$$

При $0 < E < 1$ имеем

$$\Psi_{+,E}^{in} = \pi^{-1/2} \begin{cases} p^{-1/2} \cdot \cos(pz + \theta) e^{-i\theta}, & z < 0, \\ p^{+1/2} \cdot e^{-qz - i\theta}, & z \geq 0, \end{cases}$$

где $\cos \theta = p \equiv E^{1/2}$, $0 < \theta < \pi/2$; $q \equiv |E - 1|^{1/2}$. При этих энергиях S -матрица состоит из одного элемента: $S_{-+} = e^{-2i\theta}$. Если же $E > 1$, то

$$\Psi_{+,E}^{in} = \pi^{-1/2} \begin{cases} \frac{p^{-1/2}}{2} \left(e^{ipz} + \frac{p-q}{p+q} \cdot e^{-ipz} \right), & z < 0, \\ \frac{p^{+1/2}}{p+q} \cdot e^{iqz}, & z \geq 0, \end{cases}$$

$$\Psi_{-,E}^{in} = \pi^{-1/2} \begin{cases} \frac{q^{+1/2}}{p+q} \cdot e^{-ipz}, & z < 0, \\ \frac{q^{-1/2}}{2} \left(e^{-iqz} + \frac{q-p}{q+p} \cdot e^{iqz} \right), & z \geq 0. \end{cases}$$

В этом случае S -матрица состоит из четырех элементов:

$$\begin{bmatrix} S_{++} & S_{+-} \\ S_{-+} & S_{--} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2(pq)^{1/2} & q-p \\ p-q & 2(pq)^{1/2} \end{bmatrix} (p+q)^{-1}.$$

Состояния рассеяния, кроме соотношений (П.11), удовлетворяют еще и соотношению полноты:

$$\int_0^1 \Psi_{+,E}^{in/out}(z) \Psi_{+,E'}^{in/out}(z') dz$$

$$+ \int_1^\infty \sum_{s=\pm} \Psi_{s,E}^{in/out}(z) \Psi_{s,E'}^{in/out}(z') dz = \delta(z - z').$$

Список литературы

- [1] V.I. Galiev, E.M. Goldys, M.G. Novak, A.F. Polupanov, T.L. Tansley. Superlat. Microstruct., **17**, 421 (1995).
- [2] V.I. Galiev, A.F. Polupanov. J. Phys. A: Math. Gen., **32**, 5477 (1999).
- [3] S.L. Chuang. Phys. Rev. B, **40**, 9649 (1989).
- [4] S.L. Chuang. Phys. Rev. B, **43**, 9649 (1991).

Редактор Л.В. Беляков

Multichannel scattering of charge carriers on quantum-well heterostructures

V.I. Galiev, A.N. Kruglov, A.F. Polupanov, E.M. Goldys, T.L. Tansley**

Institute for Radioengineering and Electronics,
Russian Academy of Sciences,
103907 Moscow, Russia

*Semiconductor Science and Technology Laboratories,
Macquarie University,
North Ryde 2109 NSW, Australia

Abstract An efficient numerical-analytical method has been developed for finding continuum states in quantum-well systems with arbitrary potential profiles that are described by coupled Schrödinger equations such as for hole states in semiconductor quantum wells. Continuum states are found accurately, the formulation being similar to the scattering problem. Scattering states (the in/out-solutions) and S -matrix have been built for the case of multichannel scattering in one-dimensional systems with quantum wells and their symmetry properties are obtained and analyzed. The method is applied to studying hole scattering by strained GaInAs-InGaAsP quantum wells. Coefficients of the hole transmission and reflection as well as delay times are calculated as functions of the energy of the incident hole for various values of parameters of structures and values of the transversal component of the momentum. At energies that do not provide the work of the channel transforming, a heavy hole into a propagating light one, the scattering of a heavy hole is a of resonant type.