

07

## Простой численный метод определения энергетического спектра носителей заряда в полупроводниковых гетероструктурах

© Г.Ф. Глинский

Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет „ЛЭТИ“, Санкт-Петербург, Россия  
E-mail: genaglinskii@mail.ru

Поступило в Редакцию 8 ноября 2017 г.

Предлагается простой численный метод определения энергетического спектра и волновых функций носителей заряда в полупроводниковых гетероструктурах (квантовые ямы, нити, точки, сверхрешетки) в приближении эффективной массы. Рассматривается общий случай многозонного  $kp$ -гамильтониана, соответствующий точке  $\Gamma$  зоны Бриллюэна. В основе метода лежит дискретное преобразование Фурье для структур с периодически изменяющимся потенциалом. Для одиночных гетероструктур такая периодичность вводится искусственно. Показано, что в рамках данного подхода эффективный матричный гамильтониан гетероструктуры может быть записан в двух унитарно-эквивалентных  $a$ - и  $k$ -представлениях. В качестве примера рассматривается однозонная  $kp$ -модель гетероструктуры с одиночной параболической, треугольной и прямоугольной квантовыми ямами. Исследуется влияние интерфейсных  $kp$ -поправок на поведение огибающих функций вблизи резких гетерограниц.

DOI: 10.21883/PJTF.2018.06.45763.17113

Одним из наиболее распространенных методов определения энергетического спектра носителей заряда в полупроводниковых гетероструктурах является метод эффективной массы [1]. Однако до недавнего времени не было единого мнения относительно вида эффективного  $kp$ -гамильтониана гетероструктуры, методов решения уравнения Шредингера, а также граничных условий, накладываемых на огибающие волновые функции на гетерограницах. В работах [2,3] впервые предложен симметричный подход к определению эффективных  $kp$ -гамильтонианов как без учета, так и с учетом спина и спин-орбитального взаимодей-

ствия, основанный на теории инвариантов [4,5]. В этих работах с точностью до квадратичных по  $\mathbf{k}$  членов были определены  $k\rho$ -гамильтонианы для электронов и дырок в гетероструктурах на основе прямозонных полупроводников  $A^3B^5$ . Было показано, что наряду с обычными  $k\rho$ -членами объемных материалов эффективные  $k\rho$ -гамильтонианы гетероструктур содержат дополнительные слагаемые, обусловленные эффектами рассеяния носителей заряда на короткодействующей части интерфейсного потенциала.

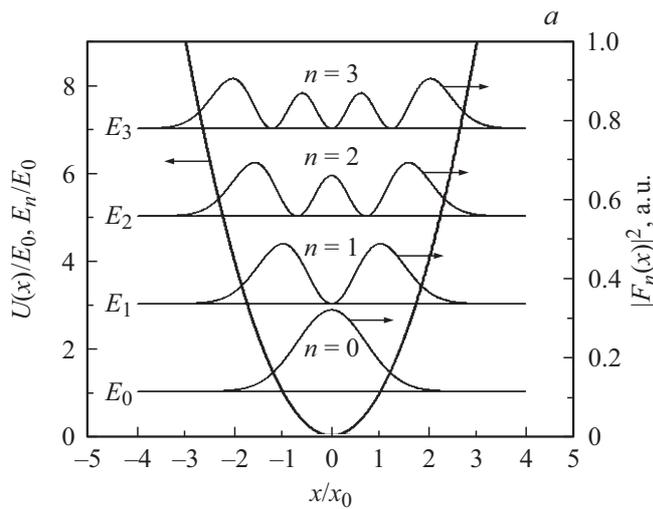
В настоящей работе предлагается простой численный метод решения уравнения Шредингера в приближении эффективной массы для произвольных гетероструктур на основе прямозонных полупроводников. Показано, что обычно используемые для этих целей дифференциальные уравнения являются континуальным приближением точных алгебраических уравнений, решение которых сводится к поиску собственных чисел и собственных столбцов матриц конечных размерностей.

Уравнение Шредингера для гетероструктуры в приближении эффективной массы в рамках многозонной модели, соответствующей точке  $\Gamma$  зоны Бриллюэна, имеет вид [2,3]

$$\sum_{n, \mathbf{k}'} H_{mn}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') F_n(\mathbf{k}') = E F_m(\mathbf{k}), \quad (1)$$

где  $H_{mn}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$  — матрица эффективного  $k\rho$ -гамильтониана,  $F_m(\mathbf{k})$  — огибающие волновые функции в  $k$ -представлении, которые можно рассматривать как Фурье-образы некоторых функций координат. Поскольку все значения волнового вектора  $\mathbf{k}$  ограничены зоной Бриллюэна кристалла, с помощью обратного преобразования Фурье можно восстановить огибающие волновые функции  $F_m(\mathbf{a})$  только в дискретных точках обычного пространства  $\mathbf{a}$  — узлах решетки Браве. Таким образом, решетка Браве выступает в роли естественной трехмерной сетки для дискретизации пространства, необходимой для реализации численных методов расчета в рамках приближения эффективной массы.

Рассмотрим наиболее общий вид трехмерной сверхрешетки, состоящей из периодически расположенных в пространстве квантовых точек. В этом случае  $\mathbf{k}$  удобно представить в виде суммы  $\mathbf{k} = \mathbf{k}_i + \mathbf{K}$ , где  $\mathbf{k}_i$  — волновые векторы, пробегающие дискретный ряд значений в зоне Бриллюэна кристалла и представляющие собой векторы обратной сверхрешетки,  $\mathbf{K}$  — волновой вектор сверхрешетки, изменяющийся в



Энергетический спектр и квадрат модуля огибающих волновых функций электрона для четырех нижних состояний  $n = 0, 1, 2, 3$  в параболической квантовой яме (a), а также для трех нижних состояний  $n = 0, 1, 2$  в прямоугольной (b) и треугольной (c) квантовых ямах в GaAs. Данные получены при следующих значениях параметров: a —  $D = 30x_0$ ,  $N = 100$ ,  $x_0 = \sqrt{\hbar/m^*\omega}$ ,  $E_0 = \hbar\omega/2$ ; b —  $D = Nx_0$ ,  $N = 100$ ,  $x_0 = a_0/2$  ( $a_0 = 0.5653$  nm), разрыв зоны  $\Delta E = 0.3$  eV, ширина ямы  $d = 40x_0$ ,  $m^* = 0.067m_0$ ; c — разрыв зоны на правом интерфейсе  $\Delta E = 1$  eV, ширина в основании квантовой ямы  $d = 40x_0$ , остальные параметры совпадают с параметрами, приведенными в подписи к части b.

пределах ее зоны Бриллюэна. При этом  $\mathbf{a}$  удобно записать в виде суммы  $\mathbf{a} = \mathbf{D} + \mathbf{a}_i$ , где  $\mathbf{D}$  — произвольный вектор трансляции сверхрешетки,  $\mathbf{a}_i$  — узлы решетки Браве кристалла, попадающие внутрь сверхъчейки. Наличие трансляционной симметрии у сверхрешетки приводит к тому, что гамильтониан, волновые функции и энергия в правой части уравнения (1) становятся параметрически зависящими от  $\mathbf{K}$ . В результате уравнение Шредингера принимает вид

$$\sum_{n,j} H_{mn}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j; \mathbf{K}) F_n(\mathbf{k}_j; \mathbf{K}) = E(\mathbf{K}) F_m(\mathbf{k}_i; \mathbf{K}). \quad (2)$$

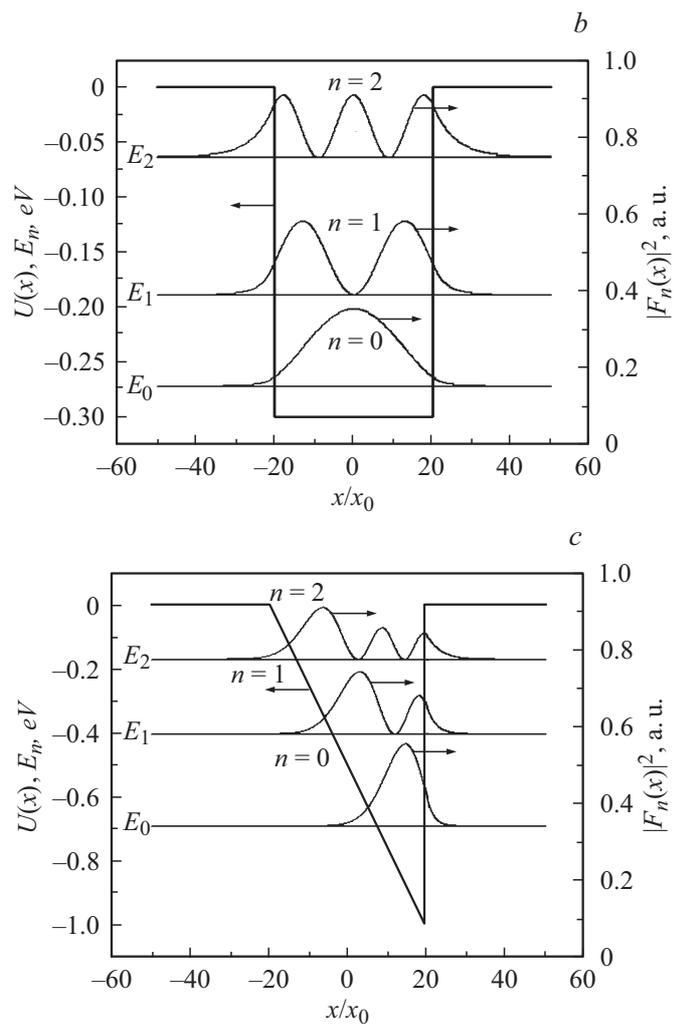


Рисунок (продолжение).

При анализе связанных состояний в одиночных квантовых точках необходимо искусственно вводить сверхрешетку, ширина барьеров

которой должна быть увеличена таким образом, чтобы исключить эффекты туннелирования носителей заряда между отдельными сверхъячейками. В этом случае ширина минизон сверхрешетки будет стремиться к нулю, и в уравнении (2) можно положить  $\mathbf{K} = 0$ . В этом приближении уравнение Шредингера для гетероструктуры с одиночной квантовой точкой принимает вид

$$\sum_{n,j} H_{mn}(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_j) F_n(\mathbf{k}_j) = E F_m(\mathbf{k}_i).$$

Это уравнение следует рассматривать как уравнение Шредингера в  $k$ -представлении. Переход к унитарно-эквивалентному  $a$ -представлению осуществляется с помощью дискретного преобразования Фурье

$$F_m(\mathbf{a}_i) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j F_m(\mathbf{k}_j) e^{i\mathbf{k}_j \mathbf{a}_i}, \tag{3}$$

$$H_{mn}(\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_j) = \frac{1}{N} \sum_{i',j'} e^{i\mathbf{k}_{i'} \mathbf{a}_i} H_{mn}(\mathbf{k}_{i'}, \mathbf{k}_{j'}) e^{-i\mathbf{k}_{j'} \mathbf{a}_j}, \tag{4}$$

где  $N$  — число элементарных ячеек кристалла, содержащихся в сверхъячейке. В результате приходим к следующему уравнению Шредингера в  $a$ -представлении:

$$\sum_{n,j} H_{mn}(\mathbf{a}_i, \mathbf{a}_j) F_n(\mathbf{a}_j) = E F_m(\mathbf{a}_i).$$

Экспоненты в формулах (3) и (4) играют роль матричных элементов унитарной матрицы  $U_{ij} = e^{i\mathbf{k}_j \mathbf{a}_i}$ , удовлетворяющей соотношениям  $U^+ U = U U^+ = I$  (где  $I$  — единичная матрица) и осуществляющей переход от одного представления к другому. Таким образом, решение уравнения Шредингера в обоих представлениях сводится к определению собственных чисел и нормированных на единицу собственных столбцов матричного гамильтониана конечной размерности.

Полная волновая функция носителя заряда в координатном представлении определяется выражением [3]

$$\psi(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{N\Omega}} \sum_{m,i} e^{i\mathbf{k}_i \mathbf{x}} F_m(\mathbf{k}_i) u_m(\mathbf{x}), \tag{5}$$

где  $u_m(\mathbf{x})$  — периодическая часть блоховской волновой функции  $m$ -й зоны в точке  $\Gamma$ ,  $\Omega$  — объем элементарной ячейки кристалла. Если

определить огибающую функцию в  $x$ -представлении как

$$F_m(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\mathbf{k}_i \cdot \mathbf{x}} F_m(\mathbf{k}_i), \quad (6)$$

то приходим к общепринятой форме записи соотношения (5) [1]

$$\psi(\mathbf{x}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \sum_m F_m(\mathbf{x}) u_m(\mathbf{x}).$$

Однако переход от волновых функций  $F_m(\mathbf{k}_i)$  к функциям  $F_m(\mathbf{x})$  в (6) не является унитарным преобразованием, поэтому  $F_m(\mathbf{x})$  не является решением какого-либо уравнения Шредингера. Только в континуальном пределе, когда  $\Omega \rightarrow 0$ , а объем зоны Бриллюэна кристалла стремится к бесконечности, эти функции можно приближенно определить, решая уравнение Шредингера в  $x$ -представлении, которое в рамках многозонной модели является системой дифференциальных уравнений с периодическими граничными условиями, накладываемыми на  $F_m(\mathbf{x})$  [3].

Очевидно, что для двумерных сверхрешеток, состоящих из периодически расположенных в плоскости  $x, y$  квантовых нитей, и одномерных сверхрешеток, образованных из квантовых ям, выращенных в направлении оси  $z$ , задача определения энергетического спектра сведется к решению соответственно двумерного и одномерного уравнений Шредингера. Эффективные гамильтонианы таких систем будут параметрически зависеть от  $\mathbf{K}_{\parallel}$ ,  $k_z$  ( $\mathbf{K}_{\parallel}$  — вектор в плоскости  $x, y$ ) и  $K_z$ ,  $k_x$ ,  $k_y$  соответственно. При переходе к одиночным квантовым нитям и квантовым ямам, когда эффектами туннелирования можно пренебречь, в этих гамильтонианах следует положить соответственно  $\mathbf{K}_{\parallel} = 0$  и  $K_z = 0$ .

В качестве примера рассмотрим электронные состояния в модельной гетероструктуре с параболической квантовой ямой и гетероструктурах на основе прямозонных полупроводников  $A^3B^5$ , содержащих одну квантовую яму, выращенную в направлении  $[001]$ , образованную в результате замещения атомов в одной подрешетке кристалла. Если период искусственной сверхрешетки равен четному числу монослоев  $N$  ( $a_0/2$  — ширина монослоя,  $a_0$  — период решетки), то задача сводится к решению одномерного уравнения Шредингера [1]. В рамках однозонной  $\Gamma_1$ -модели, не учитывающей поправок от короткодействующей части

интерфейсного потенциала, эффективный гамильтониан электрона в  $k$ -представлении можно записать в следующем виде [3]:

$$H(k_i, k_j) = \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m^*} \delta_{ij} + U(k_i - k_j).$$

Здесь  $m^*$  — эффективная масса электрона,  $k_i = (2\pi/D)i$  — волновой вектор электрона, направленный вдоль оси  $z$ ,  $D = Na_0/2$  — период сверхрешетки,  $i = -N/2 \dots N/2 - 1$  ( $k_x = k_y = 0$ ),  $U(k_i - k_j)$  — Фурье-образ потенциальной энергии  $U(a_i)$ , заданной в дискретных точках  $a_i = (a_0/2)i$  и определяющей пространственное распределение потенциала в гетероструктуре в направлении оси  $z$ ,

$$U(k_i - k_j) = \frac{1}{N} \sum_{i'} U(a_{i'}) e^{-i(k_i - k_j)a_{i'}}.$$

В качестве модельной тестовой задачи рассмотрим одиночную квантовую яму с параболическим потенциалом  $U(a_i) = (m^* \omega^2 a_i^2)/2$ , для которой в континуальном приближении известно точное аналитическое решение для собственных волновых функций  $F_n(z)$  и энергий  $E_n = \hbar\omega(n + 1/2)$ , где  $n = 0, 1, 2, \dots$ . На рисунке (часть  $a$ ) представлены результаты численного расчета огибающих функций  $F(z)$  для четырех нижних состояний электрона в параболической яме. Для параметров квантовой ямы, приведенных в подписи к рисунку,  $a$ , относительная погрешность определения энергетического спектра для 50 нижних уровней энергии не превышала  $10^{-10}\%$ .

Аналогичные данные для модельных гетероструктур с одиночной прямоугольной и треугольной квантовыми ямами в GaAs приведены соответственно на частях  $b$  и  $c$  рисунка. Анализ показывает, что учет в эффективном  $kp$ -гамильтониане гетероструктуры поправок, обусловленных короткодействующей частью интерфейсного потенциала [3], на резком интерфейсе приводит к разрыву огибающей функции  $F(z)$  и ее производной, а также к изменению энергетического спектра электрона.

Таким образом, определение энергетического спектра и волновых функций носителей заряда в гетероструктурах в рамках метода эффективной массы сводится к решению системы линейных алгебраических уравнений. Переход же от этой системы к дифференциальному уравнению или к системе дифференциальных уравнений для многозонной  $kp$ -модели является лишь континуальным приближением этих точных уравнений.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства образования и науки РФ (проектная часть, 16.1750.2017/4.6).

## Список литературы

- [1] *Ivchenko E.L., Pikus G.E.* Superlattices and other heterostructures. Symmetry and optical phenomena. Springer Ser. in Solid-State Sciences. Springer-Verlag, 1997. V. 110. 370 p.
- [2] *Глинский Г.Ф.* Полупроводники и полупроводниковые наноструктуры: симметрия и электронные состояния. СПб.: Технолит, 2008. 324 с.; <http://www.twirpx.com/file/1014651/>
- [3] *Глинский Г.Ф., Миронова М.С.* // ФТП. 2014. Т. 48. В. 10. С. 1359–1369.
- [4] *Бир Г.Л., Пикус Г.Е.* Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. М.: Наука, 1972. 584 с.
- [5] *Глинский Г.Ф.* Методы теории групп в квантовой механике. СПб.: Изд-во СПбГЭТУ „ЛЭТИ“, 2012. 200 с.; <http://www.twirpx.com/file/1014645/>