

Модель для описания рассеяния дырок на гетерограницах GaAs/AlAs(001)

© Г.Ф. Караваев, В.Н. Чернышов[†]

Сибирский физико-технический институт при Томском государственном университете,
634050 Томск, Россия

(Получена 31 мая 2004 г. Принята к печати 14 июля 2004 г.)

На основе 18-зонной k_p -модели проведен анализ волновых функций состояний валентной зоны. Найдено, что обычно используемое приближение не зависящих от энергии эффективных масс для зон легких и тяжелых дырок оправдано только вблизи вершины валентной зоны. Рассмотрены условия сшивания огибающих функций дырок на гетерограницах GaAs/AlAs с ориентацией (001) как с учетом, так и без учета спин-орбитального взаимодействия для энергий в окрестности вершины валентной зоны. Они получены в результате упрощения описания электронных состояний методом псевдопотенциала. Показано, что существует смешивание легких и тяжелых дырок на гетерогранице. Полученные условия сшивания полностью согласуются с симметрией задачи. В них присутствуют смешивание огибающих функций с их нормальными производными и смешивание производных с функциями. Параметры, характеризующие смешивание легких и тяжелых дырок на гетерогранице, достаточно малы, что согласуется с недавними расчетами других авторов, но противоречит более ранним предположениям и оценкам.

Существует значительный интерес к исследованию дырочных состояний в наноструктурах. Он поддерживается не только необходимостью рассмотрения общих проблем поведения элементарных возбуждений в структурах с гетерограницами, но и множеством практических потребностей описания электрических, оптических и других свойств наноструктур, в которых существенное значение имеют процессы взаимодействия электронов и дырок с гетерограницами.

Имеются существенные отличия в описании рассеяния электронов и дырок в наиболее популярных гетероструктурах GaAs/AlAs. Электроны обычно занимают одну зону проводимости. Поэтому при рассмотрении рассеяния электронов на гетерограницах в некотором интервале энергий (ниже дна зоны проводимости AlAs) в принципе можно ограничиться однозонным методом эффективной массы [1], однако с более точным определением условий сшивания для огибающих. Разумеется, для более высоких энергий необходимо учитывать смешивание различных состояний в зонах проводимости GaAs и AlAs. Для описания данного смешивания разработаны различные модели сшивания огибающих функций [2–5]. Расщепление зоны проводимости спин-орбитальным взаимодействием незначительно и им можно пренебречь.

В отличие от электронов, при описании дырочных состояний необходимо учитывать спин-орбитальное взаимодействие и принципиально многозонный характер валентной зоны. В небольшом энергетическом интервале в окрестности вершины валентной зоны (E_v) имеется (с учетом спина) 6 валентных зон. Это зоны тяжелых дырок, зоны легких дырок и спин-отщепленные зоны. Поэтому модель сшивания огибающих функций для дырок изначально должна быть многозонной.

Имеется ряд работ, посвященных разработке теоретических моделей и их применению для описания

рассеяния дырок гетерограницами. Эти работы выполнены в основном в рамках метода огибающих функций, поскольку он позволяет относительно простыми средствами рассмотреть сложные явления, протекающие в гетероструктурах [6–15]. Некоторые работы выполнены в рамках метода сильной связи [16] или с применением метода псевдопотенциала [17]. Однако до сих пор отсутствуют исследования, которые бы установили связь между этими различными подходами, хотя необходимость таких исследований признается важной [6,14,15]. Во всех работах [6–15] использование метода огибающих функций сопровождается постулированием того или иного вида условий сшивания их на гетерограницах. Чаще всего считается, что огибающие функции непрерывны на гетерогранице, а условия сшивания их производных находятся путем интегрирования системы уравнения для огибающих по малому интервалу, включающему гетерограницу. Такой подход приводит к тому, что на гетерогранице с ориентацией (001) не происходит смешивания состояний легких и тяжелых дырок с равным нулю волновым вектором, параллельным гетерогранице [6]. Вместе с тем подобное смешивание не запрещено симметрией структуры, а обнаруженная в экспериментах гигантская анизотропия обменного расщепления экситонных уровней может быть объяснена при наличии такого смешивания. Именно для объяснения этих экспериментов авторы работ [6,18,19] предложили ввести в условия сшивания производных огибающих функций член, который отвечает за смешивание легких и тяжелых дырок на гетерогранице, и оценили его величину путем сравнения с экспериментом и с расчетами других авторов.

Насколько нам известно, прямого анализа условий сшивания огибающих функций дырок на гетерогранице GaAs/AlAs выполнено не было. Этот пробел мы попытались восполнить настоящей статьей, имея в виду большой интерес к данной проблеме и получаемые

[†] E-mail: vnchern@elefot.tsu.ru

на основе предложенных ранее моделей существенные выводы.

Напомним кратко основные идеи метода нахождения граничных условий для огибающих, использованного нами ранее для состояний в зоне проводимости [3,5] и развитого без учета спин-орбитального взаимодействия. Пусть мы имеем гетероструктуру, содержащую несколько слоев. Пронумеруем эти слои номером l в порядке их расположения слева направо. В модели с разрывным на границе потенциалом общее решение уравнения Шредингера Ψ^l в среде с номером l при фиксированных значениях энергии E и параллельной гетерогранице компоненте волнового вектора \mathbf{k}_{\parallel} можно представить в виде

$$\Psi^l = \sum_{\nu} C_{\nu}^l \Psi_{\mathbf{k}_{\nu}}^l, \quad (1)$$

где $\mathbf{k}_{\nu} = \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{k}_{\perp\nu}$ — волновые векторы для подсистемы с номером l ; $\mathbf{k}_{\perp\nu}(E, \mathbf{k}_{\parallel})$ — перпендикулярные границе векторы, которые находятся при рассмотрении так называемой комплексной зонной структуры; $\Psi_{\mathbf{k}_{\nu}}^l$ — частные решения уравнения Шредингера для среды l , нумеруемые вектором \mathbf{k}_{ν} . Число различных частных решений в разложении (1) зависит от использованного базиса для представления волновых функций и равно $2\nu_{\max}$, где ν_{\max} — число различных независимых проекций базисных функций на плоскость границы.

Из требования равенства волновых функций и их нормальных производных на каждой гетерогранице находятся $2\nu_{\max}$ соотношений, накладываемых на коэффициенты, например C_{ν}^1 и C_{ν}^2 :

$$\mathbf{C}^1 = \mathbf{I}(z_0)\mathbf{C}^2, \quad (2)$$

где \mathbf{C} — вектор-столбец с компонентами C_{ν} ; $\mathbf{I}(z_0)$ — так называемая матрица сшивания на гетерогранице $z = z_0$, разделяющей среды с номерами 1 и 2. В принципе соотношений типа (2) вместе с условиями на бесконечности достаточно для решения квантовой задачи в структурах любой сложности. Однако большая размерность матрицы $\mathbf{I}(z_0)$ и ее сильная зависимость от энергии затрудняют использование такого подхода.

Перейдем к описанию используемой нами методики построения упрощенных моделей. В основу наших моделей положен метод огибающих функций для гетероструктур. Обоснованием данного приближения служит то обстоятельство, что различия в потенциальной энергии электронов, находящихся в разных кристаллах, зачастую существенно меньше, чем изменения в потенциальной энергии электронов в пределах элементарной ячейки объемного кристалла.

Запишем общее решение (1) в виде суммы по зонам m и по опорным точкам \mathbf{k}_{ν_0} зоны Бриллюэна для гетерограниц, параллельных плоскости (001):

$$\Psi^l = \exp[i(q_x x + q_y y)] \sum_{m\nu_0} F_{\nu_0 m}^l(z) |\mathbf{K}_{\nu_0 m}^l\rangle, \quad (3)$$

где $\mathbf{q}_{\nu} = \mathbf{k}_{\nu} - \mathbf{k}_{\nu_0}$, $|\mathbf{K}_{\nu_0 m}^l\rangle$ — блоховские волновые функции в точках \mathbf{k}_{ν_0} . Опорные точки \mathbf{k}_{ν_0} могут быть произвольными, но удобнее их выбирать равными значениям

волнового вектора на дне различных долин. Таким образом, всю совокупность $\mathbf{k}_{\perp\nu}$ можно разделить на несколько групп, каждая из которых характеризуется своим значением \mathbf{k}_{ν_0} . Ясно, что функции $F_{\nu_0 m}^l(z)$ имеют смысл огибающих функций. Используя (1) и (3), легко увидеть, что функции $F_m^l(z)$ (мы опускаем здесь и ниже индекс ν_0) можно представить в виде

$$F_m^l(z) = \sum_{\nu} C_{\nu}^l D_m^l(\mathbf{k}_{\nu}) \exp(iq_{z\nu} z), \quad (4)$$

где коэффициенты разложения $D_m^l(\mathbf{k}_{\nu})$ находятся из системы алгебраических уравнений $\mathbf{k}\mathbf{p}$ -метода. Полагая в (3) $z = z_0$, связь огибающих функций и их производных с коэффициентами C^l можно представить в матричном виде:

$$\mathbf{F}^l(z_0) = \Phi^l(z_0)\mathbf{C}^l, \quad (5)$$

где \mathbf{F} — вектор-столбец размерностью $2m_{\max}$ с компонентами $F_m(z_0)$ и $F_m'(z_0)$; Φ^l — матрица размерности $(2m_{\max} \times 2\nu_{\max})$, матричные элементы которой легко определить, используя соотношения (3)–(4). Здесь m_{\max} — число учтенных долин в разложении (3). Обычно при проведении численных расчетов, например методом псевдопотенциала, $\nu_{\max} < m_{\max}$, поэтому в (5) число огибающих и их производных превышает число различных произвольных коэффициентов C_{ν}^l .

Ясно, что из условий сшивания для волновых функций (2) однозначные условия сшивания для огибающих можно получить только в случае квадратных матриц Φ , т.е. в (3) необходимо выбирать разные зависимые F_m^l в количестве ν_{\max} . В этом случае из (2) получаем

$$\mathbf{F}^1(z_0) = \mathbf{T}(z_0)\mathbf{F}^2(z_0), \quad (6)$$

где матрица сшивания \mathbf{T} для огибающих имеет вид

$$\mathbf{T}(z_0) = \Phi^1(z_0)\mathbf{I}(z_0)[\Phi^2(z_0)]^{-1}. \quad (7)$$

Адекватность условий сшивания для огибающих (6) решаемой задаче может быть определена из анализа соотношений (4)–(7) в каждом конкретном случае.

Задачу определения условий сшивания для огибающих функций существенно упрощает тот факт, что обычно интересуются квантовыми состояниями в небольшом энергетическом интервале, где число $2\nu_m$ различных существенных коэффициентов C_{ν}^n достаточно мало по сравнению с $2\nu_{\max}$. Данное обстоятельство следует из того, что матрица $\mathbf{I}(z_0)$ имеет почти квазидиагональный вид и в ней с хорошей точностью можно выделить блок размерности $(2\nu_m \times 2\nu_m)$ ($\nu_m \ll \nu_{\max}$), связывающий данные C_{ν}^n . Поэтому достаточно ввести ν_m огибающих функций и считать, что в (6) величина \mathbf{F} есть вектор-столбец с компонентами $F_m(z_0)$ и $F_m'(z_0)$ ($m = 1, \dots, \nu_m$). При этом матрица сшивания огибающих функций $\mathbf{T}(z_0)$ размерности $(2\nu_m \times 2\nu_m)$ оказывается слабо зависящей от энергии. В результате достигается существенное упрощение исходной задачи и возникает соответствующая модель.

Таким образом, имеют место две основные проблемы, которые необходимо решить при получении достаточно точных граничных условий в модели огибающих функций.

1. Определение количества ν_m огибающих функций, входящих в граничные условия. Данная величина определяется из анализа матриц сшивания (2), полученных с помощью численных расчетов методом псевдопотенциала, и зависит от ориентации гетерограниц, области энергий, значений параллельных гетерограницам компонент волнового вектора \mathbf{k}_{\parallel} .

2. **кп**-модель для расчета зонной структуры должна быть достаточно простой, но в то же время хорошо воспроизводить данные псевдопотенциальных расчетов для отмеченных выше наиболее важных ветвей комплексной зонной структуры. Возникающие при этом так называемые „фиктивные“ решения, как не удовлетворяющие условиям применимости приближенной **кп**-модели и отсутствующие в более точных моделях, должны быть отброшены и не учитываться при построении общих решений. Отметим, что при построении **кп**-модели для расчета зонной структуры число учтенных долин m_{\max} в разложении (3) может быть и больше ν_m , но в условия сшивания (6) входят только ν_m огибающих функций.

Рассмотренный выше подход можно обобщить в случае учета спин-орбитального взаимодействия. При этом частные решения $\Psi_{\mathbf{k}_v}^l$ и базисные функции $|\mathbf{K}_{\nu_0 m}^l\rangle$ становятся двухкомпонентными спинорами, а порядки матриц $\mathbf{I}(z_0)$ и $\mathbf{T}(z_0)$ удваиваются.

В данной работе мы ограничились более простой схемой учета спин-орбитального взаимодействия. На первом этапе вычислений находились матрицы сшивания огибающих функций $\mathbf{T}(z_0)$ и базисные функции $|\mathbf{K}_{\nu_0 m}^l\rangle$ без учета спин-орбитального взаимодействия. Затем строилась соответствующая **кп**-модель для расчета зонной структуры в базисе из функций $|\mathbf{K}_{\nu_0 m}^l\rangle\alpha$, $|\mathbf{K}_{\nu_0 m}^l\rangle\beta$, где α и β — двухкомпонентные спиноры с проекциями спина σ_z на ось z , равными $1/2$ и $-1/2$ соответственно:

$$\alpha = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \beta = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

кп-гамильтониан при таком подходе — матрица размерности $(2m_{\max} \times 2m_{\max})$:

$$H_{\mathbf{kp}} = H_{\mathbf{kp}}^0 + H_{\text{SO}}, \quad (8)$$

$$H_{\mathbf{kp}}^0 = \begin{pmatrix} \bar{H}_{\mathbf{kp}}^0 & 0 \\ 0 & \bar{H}_{\mathbf{kp}}^0 \end{pmatrix}. \quad (9)$$

Здесь $\bar{H}_{\mathbf{kp}}^0$ — **кп**-гамильтониан без учета спин-орбитального взаимодействия; H_{SO} — матрица оператора спин-орбитального взаимодействия.

Мы провели псевдопотенциальные расчеты и построили модели огибающих функций для гетероструктур GaAs/AlAs ориентации (001) при $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$. Данный выбор \mathbf{k}_{\parallel} обусловлен тем, что дырочные состояния для этих материалов в основном расположены в окрестности

точки Γ (Γ_{15} — состояния без учета спина). Другие долины (X и L) расположены либо значительно ниже по энергии в валентной зоне, либо значительно выше в зоне проводимости, поэтому состояния данных долин не рассматриваются в **кп**-модели, а соответствующие огибающие не присутствуют в граничных условиях. Следовательно, в функциях $|\mathbf{K}_{\nu_0 m}^l\rangle\alpha$ и $|\mathbf{K}_{\nu_0 m}^l\rangle\beta$ индекс ν_0 соответствует только различным Γ -состояниям. Индекс ν_0 поэтому в дальнейшем будем опускать.

При построении **кп**-модели (без учета спина) мы учитывали состояния Γ_{15v} , Γ_{1c} , Γ_{15c} и Γ_{12c} . Здесь индексы v и c указывают на принадлежность состояний к валентной зоне и зоне проводимости соответственно. Таким образом, с учетом вырождения данных состояний $\bar{H}_{\mathbf{kp}}^0$ — матрицы размерности (9×9) , а $H_{\mathbf{kp}}^0$ и $H_{\mathbf{kp}}$ — (18×18) . Мы учитывали следующие матричные элементы оператора спин-орбитального взаимодействия:

$$\begin{aligned} \langle X_v | H_{\text{SO}} | Y_v \rangle &= -i\Delta_0/3; & \langle X_c | H_{\text{SO}} | Y_c \rangle &= -i\Delta_1/3; \\ \langle X_v | H_{\text{SO}} | Y_c \rangle &= -i\bar{\Delta}/3. \end{aligned} \quad (10)$$

Здесь $|X_v\rangle$, $|Y_v\rangle$, $|X_c\rangle$, $|Y_c\rangle$ — состояния симметрии Γ_{15} типа X и Y . Используя свойства симметрии, остальные матричные элементы H_{SO} легко можно получить из (10). Как показали наши исследования, состояния Γ_{12c} вносят незначительный вклад в случае рассматриваемой гетерограницы, поэтому матричными элементами $\langle X_v | H_{\text{SO}} | \Gamma_{12c} \rangle$ и $\langle X_c | H_{\text{SO}} | \Gamma_{12c} \rangle$ можно пренебречь.

Значения параметров Δ_0 , Δ_1 и $\bar{\Delta}$ хорошо известны из различных литературных данных [20,21]. В наших расчетах мы использовали следующие значения: $\Delta_0 = 0.341$ эВ, $\Delta_1 = 0.171$ эВ, $\bar{\Delta} = -0.061$ эВ для GaAs и $\Delta_0 = 0.30$ эВ, $\Delta_1 = 0.15$ эВ, $\bar{\Delta} = -0.05$ эВ для AlAs.

Условия сшивания для огибающих имеют вид (6), в котором \mathbf{F} есть вектор-столбец с компонентами $F_m(z_0)\alpha$, $F_m(z_0)\beta$ и $F'_m(z_0)\alpha$, $F'_m(z_0)\beta$ ($m = 1, \dots, \nu_m$). Мы не предполагаем дополнительного смешивания состояний гетерограницами при учете спин-орбитального взаимодействия. Следовательно, матрица сшивания для огибающих при учете спин-орбитального взаимодействия $\mathbf{T}(z_0)$ имеет вид

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} \bar{T}_{11} & 0 & \bar{T}_{12} & 0 \\ 0 & \bar{T}_{11} & 0 & \bar{T}_{12} \\ \bar{T}_{21} & 0 & \bar{T}_{22} & 0 \\ 0 & \bar{T}_{21} & 0 & \bar{T}_{22} \end{pmatrix}, \quad (11)$$

где \bar{T}_{ij} ($i, j = 1, \dots, \nu_m$) — блоки матрицы $\bar{\mathbf{T}}(z_0)$, найденные при решении задачи без учета спин-орбитального взаимодействия. Блок \bar{T}_{11} соответствует сшиванию огибающих функций для состояний $|\mathbf{K}_m^l\rangle\alpha$, $|\mathbf{K}_m^l\rangle\beta$ при $m = 1, \dots, \nu_m$, \bar{T}_{22} — их производных, а \bar{T}_{12} и \bar{T}_{21} — сшиванию функций с производными и наоборот.

При решении различных задач, в которых принимается во внимание спин-орбитальное взаимодействие, часто вместо функций с определенными значениями проекций спина на ось z $|\mathbf{K}_m^l\rangle\alpha$ и $|\mathbf{K}_m^l\rangle\beta$ используются собственные функции оператора момента импульса

$|j, m_j\rangle$, ($j = 3/2, 1/2$; $m_j = \pm 1/2, \dots, \pm j$). В частности, вместо функций состояния Γ_{15v}

$$|X_v\rangle\alpha, |Y_v\rangle\alpha, |Z_v\rangle\alpha, |X_v\rangle\beta, |Y_v\rangle\beta, |Z_v\rangle\beta \quad (12)$$

можно использовать их линейные комбинации:

$$\begin{aligned} |3/2, 3/2\rangle &= (1/\sqrt{2})(X_v + iY_v)\alpha, \\ |3/2, -3/2\rangle &= (1/\sqrt{2})(X_v - iY_v)\beta, \\ |3/2, 1/2\rangle &= (1/\sqrt{6})[(X_v + iY_v)\beta - 2Z_v\alpha], \\ |3/2, -1/2\rangle &= (1/\sqrt{6})[(X_v - iY_v)\alpha + 2Z_v\beta], \\ |1/2, 1/2\rangle &= (1/\sqrt{3})[(X_v + iY_v)\beta + Z_v\alpha], \\ |1/2, -1/2\rangle &= (1/\sqrt{3})[-(X_v - iY_v)\alpha + Z_v\beta]. \end{aligned} \quad (13)$$

Известно, что первые 4 функции из набора (13) образуют базис представления Γ_8 двойной группы T_d^2 , две последние — базисные функции представления Γ_7 . Соответствующие линейные комбинации могут быть построены и из функций состояния Γ_{15c} . Такие функции далее мы будем обозначать с индексом c у функций $|j, m_j\rangle_c$.

Перейдем к рассмотрению полученных результатов. Рассеяние электронов гетерограницами исследовано в приближении разрывного на гетерограницах псевдопотенциала с использованием техники матрицы рассеяния [3,5,22], комплексная зонная структура определялась методом эмпирического псевдопотенциала. Детальное изложение методов расчета приведено в работах [3,5]. Для вычислений использовались псевдопотенциалы [23]. Вычисления проводились в интервале энергий от 0 до -0.5 эВ. Отсчет энергии выбран от вершины валентной зоны GaAs. В обсуждаемых далее матрицах сшивания для огибающих функций матричные элементы приведены в атомных единицах. Предполагается, что GaAs находится слева от AlAs, гетерограница выбрана проходящей по общей плоскости из атомов As.

Как показал анализ матриц сшивания $\mathbf{I}(z_0)$, без учета спин-орбитального взаимодействия для энергий в окрестности вершины валентной зоны основной вклад в условия сшивания для волновых функций вносят зона симметрии Δ_1 и двукратно вырожденная зона $\Delta_3 + \Delta_4$. Показано, что при использовании уже упомянутой 9-зонной **kp**-модели эти наиболее важные ветви комплексной зонной структуры хорошо воспроизводят данные псевдопотенциальных расчетов. В условия сшивания для огибающих входят 3 состояния Γ_{15v} типа:

$$|Z_v\rangle, \quad |(X_v + Y_v)/\sqrt{2}\rangle, \quad |(X_v - Y_v)/\sqrt{2}\rangle. \quad (14)$$

Пусть \mathbf{F} — вектор-столбец с компонентами $F_m(z_0)$, $F'_m(z_0)$, $m = 1, 2, 3$, расположенными в порядке, соответствующем (14). Матрица сшивания для огибающих \bar{T} размерности (6×6) в соответствии с симметрией задачи (группа C_{2v}) разбивается на три квазидиагональных блока с размерностями (2×2) , соответствующих состояниям Δ_1 , Δ_3 и Δ_4 . Численные значения матричных элементов t_{ij} ($i, j = 1, \dots, 6$) матрицы \bar{T} находятся с

помощью (7) с последующим усреднением по энергии. Мы нашли, что $t_{11} = 1.045$, $t_{22} = t_{33} = 1.048$. Отличие данных чисел от 1 обусловлено различиями в волновых функциях состояний Γ_{15v} для GaAs и AlAs и указывает на разрывность огибающих функций на гетерогранице. Производные от огибающих функций для различных материалов связаны между собой через матричные элементы $t_{44} = 0.618$ и $t_{55} = t_{66} = 1.099$. Эти численные значения отражают различия в эффективных массах для GaAs и AlAs. Связь огибающих функций симметрии $\Delta_3(\Delta_4)$ с их производными и наоборот дается через матричные элементы $t_{25} = -t_{36} = -0.297$ и $t_{52} = -t_{63} = -0.0059$ соответственно. Как мы увидим далее при учете спин-орбитального взаимодействия, именно эти матричные элементы определяют смешивание состояний легких и тяжелых дырок. В соответствии с симметрией задачи остальные элементы матрицы \bar{T} равны нулю. Расчеты коэффициентов прохождения дырок для различных структур с квантовыми ямами и барьерами показали адекватность предложенной модели.

Перейдем к рассмотрению результатов с учетом спин-орбитального взаимодействия. В области энергий в окрестности E_v расположены 3 двукратно вырожденные зоны симметрии Δ_5 двойной группы. Это зоны тяжелых (h), легких дырок (l) и расположенная при $k = 0$ ниже по энергии на величину, близкую к Δ_0 , спин-отщепленная зона (s). Матрица сшивания для огибающих \mathbf{T} размерности (12×12) в базисе из функций

$$\begin{aligned} &|Z_v\rangle\alpha, |Z_v\rangle\beta, (1/\sqrt{2})|X_v + Y_v\rangle\alpha, (1/\sqrt{2})|X_v + Y_v\rangle\beta, \\ &(1/\sqrt{2})|X_v - Y_v\rangle\alpha, (1/\sqrt{2})|X_v - Y_v\rangle\beta \end{aligned} \quad (15)$$

может быть получена из \bar{T} с помощью (11).

Анализ волновых функций, соответствующих огибающих и условия их сшивания удобнее проводить не в базисе из функций $|K_m^l\rangle\alpha$ и $|K_m^l\rangle\beta$, а в базисе $|j, m_j\rangle$, так как именно эти функции образуют базис представления Δ_5 двойной группы C_{2v} . При таком выборе мы имеем два набора волновых функций для двукратно вырожденных состояний представления Δ_5 . Первый является линейной комбинацией функций $|3/2, -3/2\rangle$, $|3/2, 1/2\rangle$, $|1/2, 1/2\rangle$ и аналогичных функций, полученных из Γ_{15c} , Γ_{12c} , Γ_{1c} . Во второй набор входят функции $|3/2, 3/2\rangle$, $|3/2, -1/2\rangle$, $|1/2, -1/2\rangle$ и соответствующие функции, построенные из Γ_{15c} , Γ_{12c} , Γ_{1c} . Эти наборы преобразуются по разным строкам двумерного представления Δ_5 и не смешиваются ни в объеме, ни на гетерограницах.

Перейдем к анализу состояний валентной зоны. Волновые функции состояний тяжелых дырок можно представить в виде

$$\begin{aligned} |h1\rangle &= \exp(ikz)D_{h1}|3/2, 3/2\rangle + |\chi_{h1}\rangle; \\ |h2\rangle &= \exp(ikz)D_{h2}|3/2, -3/2\rangle + |\chi_{h2}\rangle, \end{aligned} \quad (16)$$

где функции $|\chi\rangle$ отражают вклад остальных базисных функций. Численные расчеты показали, что $|D_h\rangle$ в указанном выше интервале энергий для GaAs изменяются

от 1 до ~ 0.93 . Таким образом, как и следовало ожидать, основной вклад в волновые функции состояний тяжелых дырок вносят функции $|3/2, -3/2\rangle$ и $|3/2, 3/2\rangle$. Функции $|\chi\rangle$ в основном связаны с $|3/2, 3/2\rangle_c$ и $|3/2, -3/2\rangle_c$ соответственно. Вклад всех остальных состояний крайне незначителен. Зоны тяжелых дырок непараболичны, зависящая от энергии эффективная масса $m_h^*(E)$ уменьшается при удалении от вершины валентной зоны. Средние значения спина (спиновых матриц Паули) $\bar{\sigma}_x$ и $\bar{\sigma}_y$ для состояний тяжелых дырок равны нулю. Для всех энергий в данном интервале в GaAs величины $\bar{\sigma}_z(h1)$ очень близки к 1, а $\bar{\sigma}_z(h2) = -1$.

Для легких дырок волновые функции запишем в виде

$$\begin{aligned} |l1\rangle &= \exp(ikz)D_{l1}|3/2, -1/2\rangle + |\chi_{l1}\rangle; \\ |l2\rangle &= \exp(ikz)D_{l2}|3/2, 1/2\rangle + |\chi_{l2}\rangle, \end{aligned} \quad (17)$$

где функции $|\chi\rangle$ имеют тот же смысл, что и ранее. Найдено, что $|D_l|$ в данном интервале энергий для GaAs изменяются от 1 до ~ 0.67 . Основной вклад в $|\chi\rangle$ связан с функциями $|1/2, -1/2\rangle$ и $|1/2, 1/2\rangle$ соответственно, причем для энергий в области спин-отщепленной зоны вклады функций $|3/2, -1/2\rangle$ и $|1/2, -1/2\rangle$ в $|l1\rangle$ (или $|3/2, 1/2\rangle$ и $|1/2, 1/2\rangle$ в $|l2\rangle$) становятся почти одинаковыми. Таким образом, часто используемое приближенное представление волновых функций легких дырок в виде (17) без слагаемого $|\chi_{l1}\rangle$ ($|\chi_{l2}\rangle$) оправдано только для энергий вблизи E_v и становится некорректным для энергий в области спин-отщепленной зоны. Зоны легких дырок также непараболичны, $m_l^*(E)$ увеличивается при удалении от вершины валентной зоны. Эта зависимость становится особенно заметной в области энергий спин-отщепленной зоны. Средние значения $\bar{\sigma}_x$ и $\bar{\sigma}_y$ для легких дырок равны нулю. Для GaAs $\bar{\sigma}_z(l1)$ в указанном интервале энергий монотонно изменяется от $-1/3$ до ~ 0.89 ($\bar{\sigma}_z(l2) = -\bar{\sigma}_z(l1)$).

Волновые функции состояний спин-отщепленной зоны представим в виде

$$\begin{aligned} |s1\rangle &= \exp(ikz)D_{s1}|1/2, -1/2\rangle + |\chi_{s1}\rangle; \\ |s2\rangle &= \exp(ikz)D_{s2}|1/2, 1/2\rangle + |\chi_{s2}\rangle. \end{aligned} \quad (18)$$

Найдено, что $|D_s|$ для GaAs в интервале энергий от вершины спин-отщепленной зоны ($-\Delta_0$) до -0.5 эВ изменяются от 1 до ~ 0.92 . Основной вклад в $|\chi\rangle$ для $|s1\rangle$ дают функции $|3/2, -1/2\rangle$, а для $|s2\rangle$ — $|3/2, 1/2\rangle$. Как и для остальных зон, $\bar{\sigma}_x = \bar{\sigma}_y = 0$. В области энергий спин-отщепленной зоны $\bar{\sigma}_z(s1)$ для GaAs монотонно изменяется от $-1/3$ до ~ 0.30 ($\bar{\sigma}_z(s2) = -\bar{\sigma}_z(s1)$).

Таким образом, анализ волновых функций показывает, что учет **kr**-взаимодействия состояний Γ_8 и Γ_7 необходим для правильного описания всех валентных зон. Кроме того, часто используемое приближение не зависящих от энергии эффективных масс для зон легких и тяжелых дырок становится некорректным при незначительном удалении от E_v . Рассмотрим условия сшивания

для огибающих функций в базисе из функций $|j, m_j\rangle$, определяемых соотношениями (13):

$$\tilde{\mathbf{F}}^1(z_0) = \tilde{\mathbf{T}}(z_0)\tilde{\mathbf{F}}^2(z_0). \quad (19)$$

Здесь $\tilde{\mathbf{F}}(z_0)$ — вектор-столбец с компонентами $\tilde{\mathbf{F}}_m(z_0)$, $\tilde{\mathbf{F}}'_m(z_0)$ ($m = 1, \dots, 6$), заданными в том же порядке, как и в (13). Ясно, что матрица сшивания для огибающих функций в этом базисе $\tilde{\mathbf{T}}$ может быть получена с помощью соответствующего унитарного преобразования из матрицы \mathbf{T} , определенной формулой (11). В результате получим матричные элементы $\tilde{t}_{i,j}$ матрицы $\tilde{\mathbf{T}}$ через элементы t_{ij} рассмотренной ранее матрицы \mathbf{T} .

Сшивание огибающих функций $\tilde{\mathbf{F}}_m$ между собой описывается матричными элементами $\tilde{t}_{i,j}$ для ($i, j = 1, \dots, 6$):

$$\begin{aligned} \tilde{t}_{11} = \tilde{t}_{22} = t_{22}; \quad \tilde{t}_{33} = \tilde{t}_{44} &= \frac{2}{3}t_{11} + \frac{1}{3}t_{22}; \\ \tilde{t}_{55} = \tilde{t}_{66} &= \frac{1}{3}t_{11} + \frac{2}{3}t_{22}; \\ \tilde{t}_{35} = -\tilde{t}_{46} = \tilde{t}_{53} = -\tilde{t}_{64} &= \frac{2}{\sqrt{3}}(-t_{11} + t_{22}). \end{aligned} \quad (20)$$

Отметим, что имеется незначительное смешивание огибающих функций $\tilde{\mathbf{F}}_m$ состояний легких дырок ($i, j = 3, 4$) и спин-отщепленной зоны ($i, j = 5, 6$), поскольку разность $t_{11} - t_{22}$ мала.

Сшиванию производных от огибающих функций $\tilde{\mathbf{F}}'_m$ между собой соответствуют матричные элементы $\tilde{t}_{i,j}$, где ($i, j = 7, \dots, 12$):

$$\begin{aligned} \tilde{t}_{77} = \tilde{t}_{88} = t_{55}; \quad \tilde{t}_{99} = \tilde{t}_{1010} &= \frac{2}{3}t_{44} + \frac{1}{3}t_{55}; \\ \tilde{t}_{1111} = \tilde{t}_{1212} &= \frac{1}{3}t_{44} + \frac{1}{3}t_{55}; \\ \tilde{t}_{911} = -\tilde{t}_{1012} = \tilde{t}_{119} = -\tilde{t}_{1210} &= \frac{2}{\sqrt{3}}(-t_{44} + t_{55}). \end{aligned} \quad (21)$$

Имеется смешивание функций $\tilde{\mathbf{F}}'_m$ гетерограницей, поскольку $t_{44} \neq t_{55}$. Именно эти матричные элементы в основном определяют смешивание гетерограницами состояний легких дырок и спин-отщепленной зоны.

Сшивание огибающих функций $\tilde{\mathbf{F}}_m$ с их производными $\tilde{\mathbf{F}}'_m$ описывается матричными элементами $\tilde{t}_{i,j}$, где ($i = 1, \dots, 6; j = 7, \dots, 12$):

$$\begin{aligned} \tilde{t}_{110} = -\tilde{t}_{29} = \tilde{t}_{38} = -\tilde{t}_{47} &= \frac{i}{\sqrt{3}}t_{25}; \\ \tilde{t}_{112} = \tilde{t}_{211} = -\tilde{t}_{58} = -\tilde{t}_{67} &= -\frac{2i}{\sqrt{6}}t_{25}. \end{aligned} \quad (22)$$

Сшивание $\tilde{\mathbf{F}}'_m$ с $\tilde{\mathbf{F}}_m$ описывают матричные элементы $\tilde{t}_{i,j}$, где ($i = 7, \dots, 12; j = 1, \dots, 6$):

$$\begin{aligned} \tilde{t}_{101} = -\tilde{t}_{92} = \tilde{t}_{83} = -\tilde{t}_{74} &= -\frac{i}{\sqrt{3}}t_{52}; \\ \tilde{t}_{121} = -\tilde{t}_{112} = -\tilde{t}_{85} = -\tilde{t}_{76} &= \frac{2i}{\sqrt{6}}t_{52}. \end{aligned} \quad (23)$$

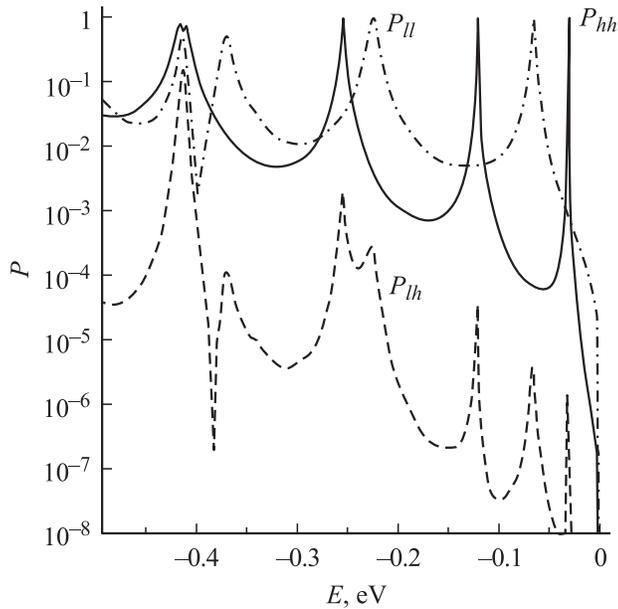


Рис. 1. Коэффициенты прохождения для структуры GaAs/AlAs(4)/GaAs(16)/AlAs(4)/GaAs ориентации (001) при $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$. Сплошной линией обозначена зависимость $P_{hh}(E)$; штрихпунктирной линией — зависимость $P_{ll}(E)$; штриховой линией — $P_{lh}(E)$.

Матричные элементы (22) и (23) в основном ответственны за смешивание гетерограницами состояний тяжелых дырок с состояниями легких дырок и спин-отщепленной зоны. Остальные элементы матрицы \bar{T} равны нулю.

Из соотношений (20)–(23) видно, что (как уже было отмечено выше) огибающие, соответствующие функциям $|3/2, -3/2\rangle$, $|3/2, 1/2\rangle$, $|1/2, 1/2\rangle$, не смешиваются на гетерограницах с огибающими функций $|3/2, 3/2\rangle$, $|3/2, -1/2\rangle$, $|1/2, -1/2\rangle$.

В качестве примера приведем результаты расчета коэффициентов прохождения для структуры GaAs/AlAs(4)/GaAs(16)/AlAs(4)/GaAs с ориентацией (001). В скобках указано число монослоев в единицах постоянной решетки. В процессе туннелирования смешиваются состояния $|h1\rangle$, $|l1\rangle$, $|s1\rangle$ (как и состояния $|h2\rangle$, $|l2\rangle$, $|s2\rangle$). Имеются следующие коэффициенты прохождения: P_{hh} , P_{ll} , P_{hl} , P_{lh} , P_{ss} , P_{sh} , P_{sl} , P_{hs} , P_{ls} . Первый индекс указывает на тип падающей волны, второй — прошедшей. Первые 4 коэффициента определены для всех энергий в указанном выше интервале энергий, последние 5 — только для энергий спин-отщепленной зоны. Все состояния в данной структуре в согласии с симметрией задачи двукратно вырождены.

На рис. 1 приведены коэффициенты прохождения P_{hh} , P_{ll} , P_{lh} ($P_{hl} \approx P_{lh}$). Имеется ряд резонансов для внутризонных коэффициентов P_{hh} , P_{ll} . Смешивание состояний (P_{lh}) тяжелых и легких дырок (hl -смешивание) мало и заметно только при резонансных энергиях. Этот результат нашей работы существенно отличается от результатов [6,18,19], где найдено сильное hl -смешивание.

Авторы [6,18,19] оценили его величину путем сравнения с экспериментом и с расчетами других авторов методом сильной связи и псевдопотенциала [24] (косвенно — через недиагональный коэффициент отражения), а также выполнили собственные расчеты методом сильной связи. В нашем расчете коэффициент отражения R_{hl} на границе GaAs/AlAs для энергий в окрестности вершины спин-отщепленной зоны примерно на порядок меньше, чем полученный в [6]. Напомним, что наш вывод о слабости hl -смешивания следует из данных расчетов методом псевдопотенциала в модели с разрывным на границе потенциалом. Непосредственное же сравнение наших результатов с [6] затруднено, поскольку мы не предполагаем непрерывность огибающих на гетерогранице (см. (20)); кроме того, в нашей модели присутствует смешивание огибающих функций \bar{F}_m с их производными \bar{F}'_m (см. (22)).

Необходимо отметить, однако, что имеются более поздние расчеты других авторов [17], которые также приводят к иным (по сравнению с [6]) результатам. Согласно псевдопотенциальному расчету [17], параметр смешивания легких и тяжелых дырок на порядок меньше полученного в феноменологических моделях в [6]. Вывод из работы [17] о характере смешивания легких и тяжелых дырок сделан на основе анализа антикроссинга уровней легких и тяжелых дырок в структурах с квантовыми ямами и в сверхрешетках с переменной шириной ям и барьеров. Сильное hl -смешивание имеет место только в том случае, когда близки энергии уровней в квантовой яме для состояний тяжелых и легких дырок [17].

На рис. 2 приведены коэффициенты прохождения P_{ss} , P_{sl} , P_{sh} ($P_{ls} \approx P_{sl}$; $P_{hs} \approx P_{sh}$) в области энергий

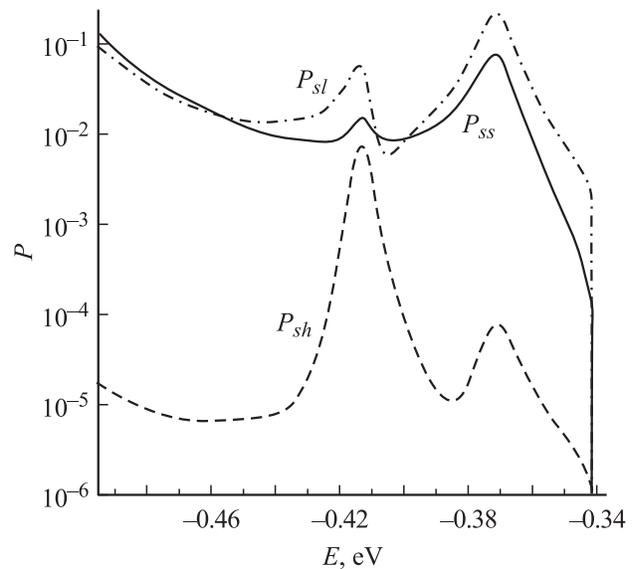


Рис. 2. Коэффициенты прохождения для структуры GaAs/AlAs(4)/GaAs(16)/AlAs(4)/GaAs при $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$ в области энергий спин-отщепленной зоны. Сплошной линией обозначена зависимость $P_{ss}(E)$; штрихпунктирной линией — зависимость $P_{sl}(E)$; штриховой линией — $P_{sh}(E)$.

спин-отщепленной зоны. Наблюдается сильное смешивание состояний из зоны легких дырок и спин-отщепленной зоны. Это связано с тем, что состояния $|s1\rangle$, $|l1\rangle$ в области энергий спин-отщепленной зоны (см. (17) и (18)) достаточно похожи друг на друга.

В заключение сформулируем основные результаты и выводы данной работы. Анализ состояний валентной зоны показал, что обычно используемое приближение не зависящих от энергии эффективных масс для зон легких и тяжелых дырок оправдано только вблизи вершины валентной зоны. Показано, что учет \mathbf{kp} -взаимодействия состояний Γ_8 и Γ_7 необходим для правильного описания валентных зон. Найдены условия сшивания для огибающих функций дырок на гетерограницах GaAs/AlAs(001) как с учетом, так и без учета спин-орбитального взаимодействия для энергий в окрестности вершины валентной зоны. Они получены в результате упрощения описания электронных состояний методом псевдопотенциала и полностью согласуются с симметрией задачи. В условиях сшивания присутствуют смешивание огибающих функций с их нормальными производными и смешивание производных с функциями — результат, ранее нигде в печати не появлявшийся. Эффективность предложенной нами модели для огибающих функций подтверждается хорошим совпадением результатов модельных и псевдопотенциальных расчетов (без учета спин-орбитального взаимодействия) коэффициентов прохождения в различных структурах. Используя найденные численные значения для элементов матрицы сшивания для огибающих функций, можно оценить параметры, характеризующие смешивание дырок на гетерогранице. Особо отметим, что в нашем расчете смешивание легких и тяжелых дырок оказалось слабым. Оно примерно на порядок слабее найденного в [6], но согласуется с выводом, сделанным в работе [17]. Полученный результат требует дальнейшего анализа с целью поиска объяснения обнаруженной в опытах анизотропии.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ № 04-02-17508.

Список литературы

- [1] D.J. BenDaniel, C.D. Duke. Phys. Rev., **152**, 683 (1966); G. Bastard. Phys. Rev. B, **24**, 5693 (1981).
- [2] T. Ando, S. Wakahara, H. Akera. Phys. Rev. B, **40**, 609 (1989); T. Ando, H. Akera. Phys. Rev. B, **40**, 11 619 (1989).
- [3] С.Н. Гриняев, В.Н. Чернышов. ФТП, **26**, 2057 (1992); Г.Ф. Караваев, С.Н. Гриняев, В.Н. Чернышов. Изв. вузов. Физика, № 9, 64 (1992).
- [4] Y. Fu, M. Willander, E.L. Ivchenko, A.A. Kiselev. Phys. Rev. B, **47**, 13 498 (1993).
- [5] Г.Ф. Караваев, С.Н. Гриняев. Изв. вузов. Физика, № 9, 89 (1998); Г.Ф. Караваев, В.Н. Чернышов. ФТП, **35** (1), 105 (2001); Г.Ф. Караваев, В.Н. Чернышов. ФТП, **35** (7), 841 (2001); Г.Ф. Караваев, В.Н. Чернышов. Изв. вузов. Физика, № 6, 51 (2003).
- [6] E.L. Ivchenko, A.Yu. Kaminski, U. Rossler. Phys. Rev. B, **54**, 5852 (1996).
- [7] F.B. Pedersen, Yia-Chung Chang. Phys. Rev. B, **53**, 1507 (1996).
- [8] G. Rau, P.C. Klipstein, V. Nikos Nicopoulos, N.F. Johnson. Phys. Rev. B, **54**, 5700 (1996).
- [9] N.J. Traynor, R.J. Warburton, M.J. Snelling, R.T. Harley. Phys. Rev. B, **55**, 15 701 (1997).
- [10] T. Sogawa, H. Ando, S. Ando, H. Kanbe. Phys. Rev. B, **58**, 15 652 (1998).
- [11] A.M. Malik, M.J. Godfrey, P. Dawson. Phys. Rev. B, **59**, 2861 (1999).
- [12] G. Bastard. *Wave Mechanics Applied to Semiconductor Heterostructures* (Les Editions de Physique, Paris, 1992).
- [13] G. Bastard. Phys. Rev. B, **24**, 5693 (1981).
- [14] Xiao-Ling Ye, Y.H. Chen, J.Z. Wang, Z.G. Wang, Z. Yang. Phys. Rev. B, **63**, 115 317 (2001).
- [15] M.V. Kisin, B.L. Gelmont, S. Luryi. Phys. Rev. B, **58**, 4605 (1998).
- [16] M. Morifuji, C. Hamaguchi. Phys. Rev. B, **52**, 14 131 (1995).
- [17] R. Magri, A. Zunger. Phys. Rev. B, **62**, 10 364 (2000).
- [18] И.Л. Алейнер, Е.Л. Ивченко. Письма ЖЭТФ, **55**, 662 (1992).
- [19] Е.Л. Ивченко, А.Ю. Каминский, И.Л. Алейнер. ЖЭТФ **104**, 3401 (1993).
- [20] M. Cardona, N.E. Christensen, G. Fasol. Phys. Rev. B, **38**, 1806 (1988).
- [21] P. Pfeffer, W. Zawadzki. Phys. Rev. B, **53**, 12 813 (1996).
- [22] D.Y. Ko, J.S. Inkson. Phys. Rev. B, **38**, 9945 (1988).
- [23] В.А. Чалдышев, С.Н. Гриняев. Изв. вузов. Физика, № 3, 38 (1983).
- [24] G. Edwards, J.C. Inkson. Sol. St. Commun., **89**, 595 (1994).

Редактор Т.А. Полянская

The model of hole scattering by GaAs/AlAs heterointerface

G.F. Karavaev, V.N. Chernyshov

Siberian Physicotechnical Institute,
Tomsk State University,
634050 Tomsk, Russia

Abstract The analysis of wave functions of the valence band states is carried out on the basis of 18-band \mathbf{kp} -model. It is found that the usually used approaches of the energy-independent effective masses for bands of light and heavy holes are justified only near the top of a valence band. The matching conditions are found for the hole envelope functions on GaAs/AlAs(001) heteroboundaries. They are obtained as a result of a simplification of description of electronic states by the pseudopotential method. The mixing of light and heavy holes on a heteroboundary was demonstrated. The matching conditions obtained completely agree with the symmetry of a problem. There is the mixing of the envelope functions with their normal derivatives as well as the mixing of derivatives with functions. It is found that parameters describing the mixing of light and heavy holes on a heteroboundary are small enough. These results conform to recent calculations of other authors but contradict the earlier guesses and estimates.