

03,10

Граничные условия для плавных огибающих волновых функций в структурах с гетеропереходами II типа

© А.Ю. Маслов, О.В. Прошина

Физико-Технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
Санкт-Петербург, Россия

E-mail: maslov.ton@mail.ioffe.ru, proshina.ton@mail.ioffe.ru

Поступила в Редакцию 21 июля 2025 г.

В окончательной редакции 18 октября 2025 г.

Принята к публикации 21 октября 2025 г.

Рассмотрена модельная задача, решения которой предполагают некоторые ограничения на возможные граничные условия в методе плавных огибающих волновых функций. Результаты данной работы могут быть важны для исследования структур с гетеропереходами II типа, которые в настоящее время широко используются в полупроводниковой электронике. Согласно нашим модельным результатам, для получения наименьших значений энергий уровней размерного квантования в таких структурах следует использовать различные граничные условия для электронов и для дырок. Проведенные расчеты энергий уровней размерного квантования показывают значительное различие результатов при использовании разных граничных условий. Это дает возможность для экспериментальной проверки результатов использования предложенной модельной задачи.

Ключевые слова: гетеропереходы II типа, граничные условия, квантовая яма, эффективная масса.

DOI: 10.61011/FTT.2025.10.61963.208-25

1. Введение

В соответствии с правилами квантовой механики на резкой гетерогранице должны выполняться непрерывность полной волновой функции и ее производной. При этом полная волновая функция представляет собой произведение блоховской амплитуды на плавную огибающую [1]. Так как в различных полупроводниковых соединениях блоховские амплитуды оказываются разными, то никаких общих правил для сшивки плавных огибающих при строгом решении задачи, вообще говоря, получить нельзя.

Однако для описания спектра уровней размерного квантования, вероятностей межзонных и внутризонных переходов, подвижности носителей и многих других свойств часто оказывается удобным использовать понятие эффективной массы. При этом достаточно часто для огибающей волновой функции $\Psi(z)$ на гетерогранице ($z = 0$) используются граничные условия Бастарда [2–4].

$$\Psi_1(z - 0) = \Psi_2(z + 0), \quad (1)$$

$$\frac{1}{m_1} \frac{d\Psi_1(z - 0)}{dz} = \frac{1}{m_2} \frac{d\Psi_2(z + 0)}{dz}. \quad (2)$$

Эти уравнения (1) и (2) удовлетворяют условию сохранения потока частиц через гетерограницу. Несмотря на многолетнее использование, область их применения остается неопределенной.

2. Модель косвенного определения граничных условий

При отсутствии строгого решения задачи о граничных условиях для плавных огибающих волновых функций определенный интерес представляют подходы, позволяющие получить эти условия из модельных соображений. В настоящей работе рассмотрена модельная задача, при решении которой возникают ограничения на возможную область применимости уравнений (1) и (2). Также наша методика предсказывает необходимость использования для ряда соединений иных граничных условий. Полученные ниже результаты могут быть важны для описания структур с гетеропереходами II типа, которые в настоящее время широко используются в полупроводниковой электронике, например, при создании квантовых ям и сверхрешеток, в которых необходимо точное управление уровнями электронов и дырок, понимания механизмов переноса заряда в подобных гетеропереходах и достижения дальнейших успехов в области фотокатализа [5,6]. Также композиты с гетеропереходами II типа, такие как, CdS/AgI, исследованные в работе [7], или CdS NP–ZnO NF из работы [8], могут использоваться для восстановления окружающей среды благодаря простоте синтеза и превосходной фотокаталитической эффективности.

Наш подход относится к гетероструктурам, в которых возникают уровни размерного квантования. Возможность его применения к одиночным гетеропереходам будет обсуждаться далее. Основное модельное предположение, сделанное в работе, состоит в том, что граничные условия для плавных огибающих соответствуют

реализации в квантовой яме электронных состояний с наименьшими значениями энергии. Это условие не имеет физического обоснования, так как граничные условия являются характеристикой гетерограницы и не должны подчиняться никаким требованиям, налагаемым на энергетический спектр. Тем не менее можно отметить, что требование минимальной энергии широко используется в различных разделах физики, а полученные ниже результаты не противоречат имеющимся данным о свойствах гетероструктур. Как будет видно из дальнейшего, наличие второй гетерограницы никак не сказывается на полученных качественных результатах. В этом смысле можно считать, что они относятся именно к свойствам отдельного гетероперехода. В то же время, предложенный подход позволяет получить количественные соотношения, которые предполагают возможность сравнения экспериментальных результатов с результатами расчетов в рамках данной модельной задачи. Именно эксперимент может подтвердить или опровергнуть возможность использования полученных ниже модельных результатов для описания свойств реальных гетероструктур.

Будем считать, что граничные условия для плавных огибающих в общем случае имеют следующий вид:

$$\frac{1}{m_b^\alpha} \Psi_b = \frac{1}{m_w^\alpha} \frac{d\Psi_w}{dz}, \quad (3)$$

$$\frac{1}{m_b^{1-\alpha}} \frac{d\Psi_b}{dz} = \frac{1}{m_w^{1-\alpha}} \frac{d\Psi_w}{dz}. \quad (4)$$

Условия (3) и (4) выполняются на гетерогранице. Ψ_i , m_i , где $i = b, w$ — волновая функция и эффективная масса в области барьера и ямы, соответственно. Уравнения (2) и (3) соответствуют непрерывности потока частиц через гетероструктуру. Разумно предположить, что параметр α меняется в пределах от нуля до единицы, то есть

$$0 \leq \alpha \leq 1. \quad (5)$$

За пределами этого интервала и волновая функция, и ее производная испытывают „скачки“ в противоположных направлениях. В рамках рассматриваемой модели это выглядит неестественно. Более подробное обсуждение данного предположения приведено в разделе „Обсуждение результатов“. Рассмотрим применение граничных условий (3) и (4) для решения классической задачи квантовой механики о симметричной квантовой яме ширины a и высотой потенциального барьера u_0 [9]. Для выбранных граничных условий получим следующие уравнения для спектра

$$\operatorname{tg} \frac{ka}{2} = \frac{q}{k} \left(\frac{m_w}{m_b} \right)^{1-2\alpha}, \quad (6)$$

$$\operatorname{tg} \frac{ka}{2} = -\frac{k}{q} \left(\frac{m_w}{m_b} \right)^{2\alpha-1}, \quad (7)$$

для симметричных и антисимметричных состояний, соответственно. Здесь $k = \sqrt{2m_w E}/\hbar a$, $q = \sqrt{2m_b(u_0 - E)}/\hbar a$.

Из уравнений (6), (7) следует, что минимальное значение энергии уровня основного состояния получается при $\alpha = 0$, если $m_b > m_w$, и при $\alpha = 1$ в противоположном случае. Более того, для рассмотренной структуры те же условия выполняются для получения наименьших значений энергии и для всех возбужденных уровней размерного квантования носителей в потенциальной яме. Таким образом, при $m_b > m_w$ наименьшим значениям энергий соответствуют граничные условия Бастарда [3], а при $m_w > m_b$ — другой вид граничных условий — непрерывность производной и скачок волновой функции на границе:

$$\frac{1}{m_b} \Psi_b = \frac{1}{m_w} \Psi_w, \quad (8)$$

$$\frac{d\Psi_b}{dz} = \frac{d\Psi_w}{dz}. \quad (9)$$

Подобный вид граничных условий также неоднократно обсуждался в литературе. Но критерий перехода от одного вида граничных условий к другому для нахождения наименьших значений энергии размерного квантования, насколько нам известно, ранее получен не был. При $m_w = m_b$ вопрос о виде граничных условий для плавных огибающих не возникает. При различных значениях эффективных масс в рамках предложенной модели возможны лишь два варианта граничных условий — (1) и (2) или (8) и (9). Никаких промежуточных значений для параметра α в нашей модели не возникает.

Данный результат получен при решении задачи о конкретной форме потенциальной энергии в области квантовой ямы. Однако мы считаем, что он имеет значительно более широкую область применения. Действительно, уравнение для спектра состояний, локализованных в квантовой яме, в рамках нашей модели имеет вид:

$$\frac{d(\ln \Psi_b)}{dz} = \gamma^{1-2\alpha} \frac{d(\ln \Psi_w)}{dz}, \quad (10)$$

где параметр $\gamma = m_w/m_b$. Оптимальное значение параметра α определяется из условия, чтобы зависящий от отношения масс коэффициент γ в правой части уравнения (10) был максимальным. Именно это условие соответствует минимальному значению энергии уровня в квантовой яме. В этом можно убедиться в тех случаях, когда зависимость волновой функции в яме или барьере известна. Так, в случае прямоугольных барьеров с потенциальной ямой произвольной формы, левая часть уравнения (10) сводится просто к величине $q = \sqrt{2m_b(u_0 - E)}/\hbar$. Таким образом, при любой заданной величине волновой функции носителя в квантовой яме минимальному значению энергии соответствует именно максимальное значение коэффициента $\gamma^{1-2\alpha}$ в правой части уравнения (10). Аналогичный результат получается также для ямы прямоугольной формы при любой форме барьеров. В целом можно утверждать, что выбор максимально возможного коэффициента в правой части уравнения (10) эквивалентен эффективно-му увеличению высоты барьеров. При этом значение

Примеры гетеропереходов, в которых следует использовать разные граничные условия

Гетеропереход	<i>c</i> -зона	<i>v</i> -зона
InP–GaAs	(8), (9)	(1), (2)
InP–AlAs	(1), (2)	(8), (9)
InP–GaSb	(8), (9)	(1), (2)
InAs–GaSb	(1), (2)	(8), (9)

энергии уровней размерного квантования оказывается наименьшим.

В полупроводниках, как правило, наблюдается корреляция между шириной запрещенной зоны и величиной эффективной массы носителей. В соединениях с большей шириной запрещенной зоны эффективные массы носителей оказываются больше. Это означает, что в гетероструктурах с переходами I типа, как правило, оказывается, что $m_b > m_w$, то есть коэффициент $\gamma < 1$, что приводит к граничным условиям Бастарда [2].

Иначе обстоит дело в гетероструктурах с переходами II типа [10]. Как правило, для них реализуется ситуация, когда соотношение между массами электронов и дырок в квантовой яме и в барьерах оказывается различным. В рамках нашей модели это означает, что для нахождения наименьших энергий уровней следует использовать разные граничные условия для электронов и для дырок. В таблице приведены некоторые структуры с гетеропереходами II типа и отмечено, для каких носителей следует использовать граничные условия (1) и (2), а для каких применяются граничные условия, соответствующие уравнениям (8) и (9), если квантовая яма расположена в зоне проводимости (*c*) или в валентной зоне (*v*). Анализ применимости граничных условий проведен по данным из [11].

Использование различных граничных условий естественно приводит к значительным изменениям при расчете энергии уровней размерного квантования. На рис. 1 приведена зависимость положения уровня энергии основного состояния электрона *E* от ширины квантовой ямы *a* для структуры InP–GaSb.

Видно, что в достаточно узких квантовых ямах шириной 20–100 Å граничные условия для такой структуры, полученные в нашей работе, дают выигрыш в несколько десятков meV. Это означает, что детальные экспериментальные исследования расположения энергетических уровней в подобных структурах с гетеропереходом II типа могут подтвердить или опровергнуть применимость предложенной модели.

Если рассматривать идеальный одиночный гетеропереход, то к нему наша модель напрямую неприменима. Однако часто в гетероструктурах происходит перераспределение электрических зарядов, появившихся благодаря наличию примесей. При этом потенциальная энергия вблизи перехода искажается, что может привести

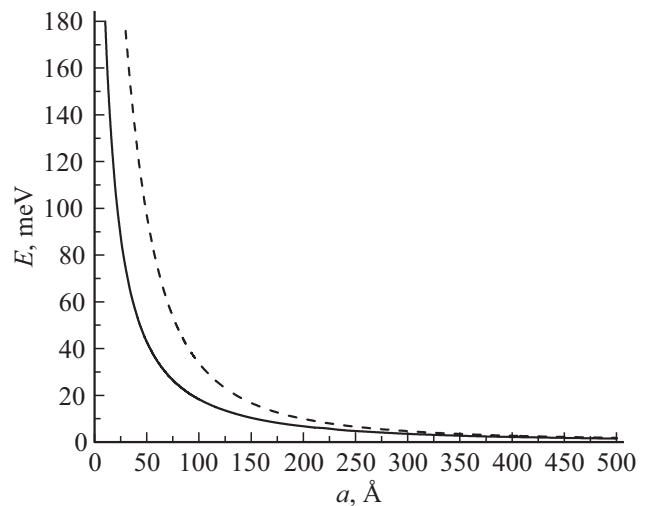


Рис. 1. Зависимость положения уровня энергии *E* для электрона в основном состоянии от ширины квантовой ямы *a* при использовании разных граничных условий. Здесь сплошная линия при $\gamma^{-1} = m_b/m_w$ соответствует полученным в работе граничным условиям (8) и (9), а пунктирная — $\gamma = m_w/m_b$ — соответствует условиям Бастарда (1) и (2).

к созданию условий, позволяющих использовать полученные выше результаты для реализации наименьших значений уровней энергии.

Достаточно часто ход потенциальной энергии вблизи границы можно аппроксимировать треугольной потенциальной ямой, высота потенциального барьера которой определяется как

$$\begin{aligned} u &= u_0 \quad \text{при} \quad z < 0, \\ u &= bz \quad \text{при} \quad z > 0, \end{aligned} \quad (11)$$

Величина u_0 соответствует разрыву зон для данного гетероперехода, а коэффициент *b* представляет собой эффективное „электрическое поле“, возникающее вблизи гетерограницы.

Уравнение (11) имеет известное решение — при $z > 0$ волновая функция выражается через функцию Эйри *Ф*. Уравнение для определения уровней энергии можно представить в безразмерном виде

$$\sqrt{1 - \gamma^{-1}k_1^2} = \beta \gamma^{1-2\alpha} \frac{\Phi'(-(k_1^2)/\beta^2)}{\Phi(-(k_1^2)/\beta^2)}, \quad (12)$$

где безразмерный параметр β выражается через высоту барьера u_0 и эффективное „электрическое поле“ *b* следующим образом

$$\beta^3 = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \frac{m_w b}{(m_b u_0)^{3/2}}. \quad (13)$$

Величина $k_1 = \sqrt{\gamma E/u_0}$. Также, как и в случае симметричной квантовой ямы, в уравнении (12) возникает та же зависимость от параметра α . Поэтому и в данном

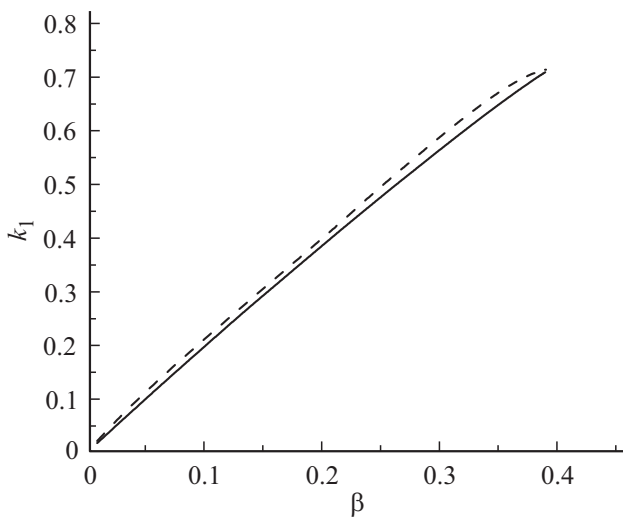


Рис. 2. Зависимость $k_1(\beta)$ для двух соотношений эффективных масс носителей в квантовой яме и барьерах. При этом сплошная линия соответствует $\gamma^{-1} = m_b/m_w$ и граничным условиям (8) и (9), а пунктирная линия — $\gamma = m_w/m_b$ — условиям (1) и (2).

случае сохраняются все выводы из предыдущего раздела, то есть при $m_w > m_b$, что соответствует $\gamma > 1$, наименьшее значение энергии в квантовой яме отвечает значению $\alpha = 0$, а при $m_w < m_b$ ($\gamma < 1$) — значению $\alpha = 1$. Отметим, что в данном случае уравнение (12) описывает некоторую универсальную зависимость значений энергии состояния от „электрического поля“ b . Для каждого изучаемого гетероперехода в уравнение (12) необходимо подставить конкретные значения зонных параметров соответствующих материалов.

На рис. 2 представлено решение уравнения (12) для $\alpha = 0$ и $\alpha = 1$. При этом видно, что имеется заметное различие между значениями параметра k_1 в этих случаях. Выражение (12) позволяет найти соответствующее различие уровней энергии. Для определенности на рис. 2 использованы значения для u_0 , m_w и m_b для зоны проводимости гетероперехода InP–GaSb [11].

Из рис. 2 видно, что за счет различия в величине параметра k_1 разница в положениях соответствующих уровней энергии может достигать 10% от величины разрыва зон u_0 . Это также дает возможность для экспериментальной проверки предложенной модели.

3. Обсуждение результатов

В работе рассмотрена модельная задача, решение которой предполагает получение наименьших значений уровней энергии носителей заряда, что приводит к существенным ограничениям для определения возможных граничных условий на гетерогранице при описании электронных состояний методом плавных огибающих волновых функций. Область применимости полученных

результатов покажут дальнейшие экспериментальные и теоретические исследования свойств гетероструктур. В рамках рассмотренной задачи получено, что в зависимости от соотношения масс носителей возможны два типа граничных условий для плавных огибающих волновых функций. При выполнении ограничений на параметр α из интервала (5) оба варианта граничных условий известны и неоднократно обсуждались в литературе. Найден критерий перехода от одного типа граничных условий к другому для получения наименьших значений энергий, который, насколько нам известно, ранее не обсуждался. Приведенные количественные расчеты показывают, что полученные в рамках предложенной модели результаты могут быть проверены экспериментально.

Отметим, что использованные в работе ограничения на параметр α из условия (5) никак не сказываются на полученных качественных результатах. То есть, и при $\alpha > 1$, и при $\alpha < 0$ сохраняются два различных типа граничных условий и полученный выше критерий перехода от одного типа условий к другому. Однако при этом возникают достаточно экзотические граничные условия, отличающиеся как от (1) и (2), так и от (9) и (10). Кроме того, минимальной энергии уровней размерного квантования соответствуют максимально возможные значения модуля параметра α . В пределе $|\alpha| \rightarrow \infty$ в квантовой яме любой ширины возникает уровень с нулевой энергией. Это противоречит известным свойствам гетероструктур. Поэтому можно считать, что значения α вне пределов интервала (5) противоречат современным экспериментальным данным, что может быть дополнительно проверено при экспериментальном исследовании структур с гетеропереходами II типа.

Отметим, что полученные качественные результаты сохраняются при любой конечной ширине квантовой ямы. При этом наличие второй гетерограницы необходимо лишь для классификации электронных состояний, что соответствует стандартному подходу к описанию электронных состояний в кристаллах конечных размеров [1]. Для структур с гетеропереходами II типа получено, что для нахождения наименьших энергий размерного квантования следует использовать различные граничные условия для электронов и дырок. Это обстоятельство, насколько нам известно, также ранее нигде не отмечалось.

4. Заключение

В настоящей работе рассматривались невырожденные энергетические зоны как для электронов, так и для дырок. Для многих полупроводниковых соединений A^2B^6 и A^3B^5 валентная зона в объемных кристаллах является вырожденной. Однако в квантовых ямах, выращенных в направлении нормалей к высоко симметричным направлениям, положения уровней энергии легких и тяжелых дырок можно рассматривать независимо. Свойства

структур, в которых происходит перемешивание дырочных состояний, требуют отдельного рассмотрения.

Полученные результаты могут быть важны, прежде всего, для описания структур с гетеропереходами II типа, которые в настоящее время широко используются в полупроводниковой электронике, например, при создании квантовых ям и сверхрешеток, в которых необходимо точное управление уровнями электронов и дырок, а также для лучшего понимания механизмов переноса заряда в подобных гетеропереходах и достижения дальнейших успехов в области фотокатализа.

Конфликт интересов

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

Список литературы

- [1] И.Ф. Гинзбург. Основы квантовой механики (нерелятивистская теория). Институт компьютерных исследований, М.-Ижевск (2018). 494 с.
- [2] G. Bastard. Phys. Rev. B **24**, 10, 5693 (1981).
- [3] Н.Ф. Гашимзаде, Е.Л. Ивченко. ФТП, **25**, 2, 323 (1991).
- [4] A.V. Rodina, A. Alekseev, A.L. Efros, M. Rosen, B.K. Meyer. Phys. Rev. B **65**, 125302 (2002).
- [5] A. Balapure, J.R. Dutta, R. Ganesan. RSC Appl. Interfaces **1**, 43 (2024).
- [6] D. Salazar-Martin, Goldie Oza, J.A. Diaz Real, A. Cervantes-Uribe, H. Perez-Vidal, M.K. Kesarla, J.G. Torres, S. Godavarthi. Appl. Surf. Sci. Adv. **19**, 100536 (2024).
- [7] I. Ahmad, M. Muneer, A.S. Khder, S.A. Ahmed. ACS Omega **8**, 25, 22708 (2023).
- [8] A.K. Bhunia. Sci. Rep. **15**, 15364 (2025).
- [9] Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. Курс теоретической физики, Т. III. Квантовая механика (нерелятивистская теория). 6-е изд., испр., Физматлит, М. (2004). 800 с.
- [10] М.П. Михайлова, К.Д. Моисеев, Ю.П. Яковлев. ФТП **53**, 3, 291 (2019).
- [11] Landolt-Bornstein: Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology. Group III: Condensed Matter, Volume 44. New data and updates for III–V, II–VI and I–VII compounds. Subvolume C / ed. U. Rossler. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 2010), 502 p.

Редактор А.Н. Смирнов