

Смешивание дырочных состояний в гетероструктурах GaAs/AlAs(110)

© В.Н. Чернышов[†]

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

(Получена 13 января 2010 г. Принята к печати 3 марта 2010 г.)

Рассмотрены состояния в квантовой яме AlAs/GaAs(12)/AlAs(110) и в сверхрешетке AlAs(6)/GaAs(12)(110). Для анализа смешивания состояний легких и тяжелых дырок в этих структурах предложена зависящая от параметра система базисных функций и найдены значения параметра, при которых одна из функций в основном описывает состояния тяжелых дырок, а другая — легких дырок. Для рассмотренного в работе интервала энергии найдено четыре энергетических уровня в данной яме и соответственно четыре мини-зоны в сверхрешетке. Анализ показал, что первый и четвертый уровни в яме и первая и четвертая мини-зоны в сверхрешетке в основном связаны с состояниями тяжелых дырок. Более сложную структуру имеют оставшиеся два состояния в квантовой яме и вторая и третья мини-зоны в сверхрешетке, для которых имеется заметное смешивание дырочных состояний. Для этих мини-зон имеется значительное как пространственное, так и спиновое разделение состояний.

Большая часть работ, посвященных изучению рассеяния электронов и дырок гетерограницами GaAs/AlAs, относится к гетероструктурам с (001)-ориентацией гетерограниц, и имеется лишь сравнительно небольшое число исследований, касающихся других гетерограниц. В то же время в ряде работ, например [1–7], отмечены некоторые достоинства в технологии выращивания слоев с (110)-ориентацией гетерограниц по сравнению с традиционно используемыми (001)-гетерограницами. Также отмечено, что такие гетероструктуры могут быть более эффективными в различных электронных и оптических устройствах. Настоящая статья посвящена расчету и анализу дырочных состояний в квантовых ямах и сверхрешетках на основе гетероструктур GaAs/AlAs(110) и является продолжением исследований, проведенных в работе [8].

Рассмотрим кратко основные идеи нашего подхода. Для получения граничных условий для огибающих функций в [8] использована модель с разрывным на гетерогранице псевдопотенциалом. Условия сшивания получены на гетерогранице $z' = z'_0$, выбранной посередине между атомными плоскостями (ось z' направлена перпендикулярно гетероструктуре). Вычисления проводились в интервале энергий от $-\Delta_0$ до ≈ 0.5 эВ, где $\Delta_0 \approx 0.34$ эВ — спин-орбитальное расщепление вершины валентной зоны GaAs, для равной нулю параллельной гетерогранице компоненты волнового вектора \mathbf{k}_{\parallel} . Отсчет энергии ведется от вершины валентной зоны E_V GaAs. Данный выбор \mathbf{k}_{\parallel} обусловлен тем, что дырочные состояния для этих материалов в основном расположены в окрестности Γ -точки. Показано, что наиболее важные ветви комплексной зонной структуры хорошо воспроизводят данные псевдопотенциальных расчетов при использовании 18-зонной \mathbf{kr} -модели (состояния симметрии Γ_{15v} , Γ_{1c} , Γ_{15c} и Γ_{12c} с учетом спинового вырождения данных

состояний). Индексы v и c указывают на принадлежность состояний к валентной зоне и зоне проводимости соответственно. При использовании такой \mathbf{kr} -модели матрица сшивания для огибающих \mathbf{T} оказывается слабо зависящей от энергии, и этой зависимостью можно пренебречь. Матрица \mathbf{T} (размерности (16×16)) связывает огибающие функций:

$$|Z_v\rangle\alpha(\beta), \quad |X_v \pm Y_v\rangle\alpha(\beta), \quad |X_c - Y_c\rangle\alpha(\beta) \quad (1)$$

и их нормальные к гетерогранице производные. Здесь $|X_{v(c)}\rangle$, $|Y_{v(c)}\rangle$, $|Z_v\rangle$ — состояния симметрии Γ_{15} типа, x, y, z ; $|X_{v(c)} \pm Y_{v(c)}\rangle = 2^{-1/2}(|X_{v(c)}\rangle \pm |Y_{v(c)}\rangle)$; $|X_{v(c)}\rangle$: α и β — двухкомпонентные спиноры с проекциями спина σ_z на ось z , равными соответственно 1 и -1 (в единицах $\hbar/2$). Матричные элементы \mathbf{T} приведены в [8]. Отметим, что эту матрицу сшивания можно использовать и для $\mathbf{k}_{\parallel} \neq 0$, если $|\mathbf{k}_{\parallel}|$ достаточно мал. Состояния же с большими значениями $|\mathbf{k}_{\parallel}|$ расположены значительно ниже вершины валентной зоны. Поэтому для таких \mathbf{k}_{\parallel} необходимо использовать \mathbf{kr} -модель, включающую состояния X-долин, и соответственно другие граничные условия для огибающих. Такого рода модели для состояний в зоне проводимости приведены, например, в работах [4,9,10].

Данное направление (при $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$) имеет группу симметрии, в которой всего два элемента точечной симметрии: тождественное преобразование и преобразование $g(xyz) = (yxz)$ (отражение в плоскости $(1\bar{1}0)$). Поэтому без учета спин-орбитального взаимодействия мы имеем два типа состояний: четные (симметрии Σ_1) и нечетные (симметрии Σ_2). В соответствии с симметрией двойной группы все объемные состояния в области энергий в окрестности E_v расщепляются при учете спина. Пары близко расположенных зон имеют симметрию Σ_3 и Σ_4 двойной группы. Это зоны тяжелых дырок ($h1$) и ($h2$), зоны легких дырок ($l1$) и ($l2$) и спин-отщепленные зоны

[†] E-mail: vnchern@elefot.tsu.ru

(s1) и (s2). Вследствие операции обращения времени имеет место соотношение $E_{\Sigma_3}(\mathbf{k}) = E_{\Sigma_4}(-\mathbf{k})$, где \mathbf{k} — вектор вдоль направления [110].

В настоящей работе для описания дырочных состояний предложена новая система базисных функций, и на ее основе проанализированы состояния в процессе туннелирования и состояния в квантовых ямах и сверхрешетках. Это связано с тем, что система базисных функций, использованная в [8], неудобна для анализа смешивания состояний легких и тяжелых дырок.

Вместо первых 6 функций (1) будем использовать их линейные комбинации $|\varphi_j\rangle$:

$$\begin{aligned} |\varphi_{1(2)}\rangle &= N \\ &\times \left((1 + \sqrt{3}\omega^*)|1(2)\rangle \pm i(1 - \sqrt{3}\omega^*)|3(4)\rangle \pm 2|5(6)\rangle \right), \\ |\varphi_{3(4)}\rangle &= N \\ &\times \left((\sqrt{3} - \omega)|1(2)\rangle \mp i(\sqrt{3} + \omega)|3(4)\rangle \mp 2\omega|5(6)\rangle \right), \\ |\varphi_{5(6)}\rangle &= 3^{-1/2}(|1(2)\rangle \pm i|3(4)\rangle \mp |5(6)\rangle), \end{aligned} \quad (2)$$

где $N = (6(1 + |\omega|^2))^{-1/2}$, ω — любое комплексное число, $|j\rangle$ — линейные комбинации функций (1):

$$\begin{aligned} |1(2)\rangle &= 2^{-1/2}(|Z_v\rangle\alpha \pm e^{-i\pi/4}|Z_v\rangle\beta), \\ |3(4)\rangle &= 2^{-1/2}(|X_v + Y_v\rangle\alpha \pm e^{-i\pi/4}|X_v + Y_v\rangle\beta), \\ |5(6)\rangle &= 2^{-1/2}(|X_v - Y_v\rangle\alpha \mp e^{-i\pi/4}|X_v - Y_v\rangle\beta). \end{aligned} \quad (3)$$

Функции $|\varphi_j\rangle$ и $|j\rangle$ есть собственные функции оператора $D_{1/2}(g)$:

$$\begin{aligned} D_{1/2}(g)|\varphi_j\rangle &= i|\varphi_j\rangle, \quad (j = 1, 3, 5), \\ D_{1/2}(g)|\varphi_j\rangle &= -i|\varphi_j\rangle, \quad (j = 2, 4, 6), \\ D_{1/2}(g)|j\rangle &= i|j\rangle, \quad (j = 1, 3, 5), \\ D_{1/2}(g)|j\rangle &= -i|j\rangle, \quad (j = 2, 4, 6). \end{aligned}$$

Функции $|\varphi_j\rangle$ и $|j\rangle$ ($j = 1, 3, 5$) преобразуются по представлению Σ_3 , а $|\varphi_j\rangle$ и $|j\rangle$ ($j = 2, 4, 6$) — по представлению Σ_4 .

Поскольку параметр ω задает унитарные преобразования базисных функций (1), матрица сшивания $\tilde{\mathbf{T}}$ для огибающих функций в этом базисе может быть получена с помощью унитарного преобразования матрицы \mathbf{T} . При этом матрица $\tilde{\mathbf{T}}$ разбивается на два блока, соответствующих состояниям симметрии Σ_3 и Σ_4 соответственно.

Функции (2) являются обобщением широко известных функций Латтинджера. Первые 4 функции из набора (2) образуют базис четырехмерного представления Γ_8 двойной группы T_d^2 , две последних — базисные функции двумерного представления Γ_7 . Поэтому в области энергий в окрестности E_v функции $|\varphi_j\rangle$ ($j = 1, 3$) (или функции $|\varphi_j\rangle$ ($j = 2, 4$)) в основном описывают

состояния легких и тяжелых дырок, а функции $|\varphi_5\rangle$ и $|\varphi_6\rangle$ — состояния спин-отщепленных зон. Заметим, что при замене $\omega \rightarrow -1/\omega^*$ функция $|\varphi_1\rangle$ с точностью до фазового множителя переходит в $|\varphi_3\rangle$ и, наоборот, $|\varphi_3\rangle$ — в $|\varphi_1\rangle$. Аналогичный вывод можно сделать для функций $|\varphi_2\rangle$ и $|\varphi_4\rangle$. Кроме того, при замене $\omega \rightarrow \omega^*$ функции (2) переходят в комплексно-сопряженные функции. Следовательно, в дальнейшем для анализа можно ограничиться значениями ω , для которых $|\omega| \leq 1$ и $\text{Im}\omega \geq 0$. При $\omega = -1/\sqrt{3}$ получаем симметризованные функции Латтинджера, которые и были использованы в [8] для анализа состояний. При $\omega = 1/\sqrt{3}$ в функциях $|\varphi_{1(2)}\rangle$ не содержатся функции $|3(4)\rangle$, а их вклад в функции $|\varphi_{3(4)}\rangle$ — максимальный. Вообще для значений ω из интервала $[0,1]$ функции $|3(4)\rangle$ дают незначительный вклад в функции $|\varphi_{1(2)}\rangle$. Так как функции $|3(4)\rangle$ образованы из функций $|X_v + Y_v\rangle$, которые вносят основной вклад в состояния легких дырок без учета спин-орбитального взаимодействия, можно ожидать, что в этом интервале ω функции $|\varphi_{1(2)}\rangle$ в основном описывают состояния тяжелых дырок, а функции $|\varphi_{3(4)}\rangle$ — легких дырок. Численные расчеты подтвердили эти предположения.

Наша цель найти такие значения параметра ω , при которых одна из функций $|\varphi_1\rangle$ (или $|\varphi_2\rangle$) в основном описывает состояния тяжелых дырок, а другая функция $|\varphi_3\rangle$ (или $|\varphi_4\rangle$) — легких дырок. Волновые функции состояний легких и тяжелых дырок для GaAs в области энергий от E_v до $-\Delta_0$ можно представить в виде:

$$\begin{aligned} |n1\rangle &= \exp(ikz') (D_{n1}|\varphi_1\rangle + D_{n3}|\varphi_3\rangle) + |\chi_{n1}\rangle, \\ |n2\rangle &= \exp(ikz') (D_{n2}|\varphi_2\rangle + D_{n4}|\varphi_4\rangle) + |\chi_{n2}\rangle, \end{aligned} \quad (4)$$

где k — проекция волнового вектора на направление (110); слагаемые $|\chi\rangle$ отражают достаточно малый для данного интервала энергий вклад остальных функций; ($n = h, l$). Поскольку для всех состояний, $|D_{n1}| \approx |D_{n2}|$, $|D_{n3}| \approx |D_{n4}|$, то далее мы ограничимся анализом состояний $|n1\rangle$ симметрии Σ_3 .

Мы провели численные расчеты зависимостей $D_{h1}(\omega)$, $D_{h3}(\omega)$, $D_{l1}(\omega)$, $D_{l3}(\omega)$ в указанном интервале энергий для различных комплексных значений ω . Отметим, что сами энергии от значения этого параметра не зависят. Нами установлено, что при некоторых вещественных значениях $\omega = \omega_{0h}$ из интервала $[0,1]$ $D_{h3}(\omega)$ обращаются в нуль, а $|D_{h1}|^2(\omega)$ при таких ω имеют максимальные значения. Также найдены $\omega = \omega_{0l}$, при которых $D_{l1}(\omega) = 0$ и $|D_{l3}|^2(\omega)$ принимают максимальные значения. Расчеты показывают, что для энергий, близких к E_v , $\omega_{0h} \approx \omega_{0l}$, а $|D_{h1}|^2(\omega_{0h})$ и $|D_{l3}|^2(\omega_{0l})$ близки к единице. Таким образом, для этих энергий при данных значениях ω функция $|\varphi_1\rangle$ практически точно описывает состояния тяжелых дырок, а функция $|\varphi_3\rangle$ — легких дырок. При удалении энергии от E_v ω_{0h} и ω_{0l} отличаются друг от друга, а $\max |D_{h1}|^2(\omega)$ и $\max |D_{l3}|^2(\omega)$ становятся меньше единицы, что связано с достаточно большим вкладом других состояний в волновые функции. Зависимости $\omega_{0h}(E)$ и $\omega_{0l}(E)$ приведены на рис. 1. Расчеты

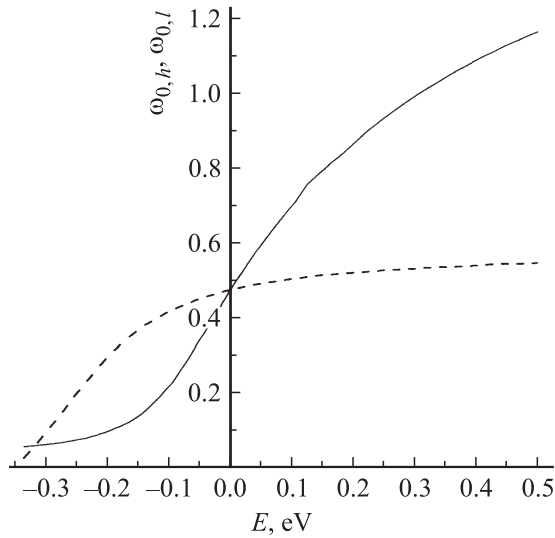


Рис. 1. Зависимости $\omega_{0h}(E)$ (сплошная линия) и $\omega_{0l}(E)$ (пунктирная линия) в GaAs.

показывают, что в окрестности $\omega_{0h}(E)$ и $\omega_{0l}(E)$ функции $|D_{h1}|^2(\omega)$ и $|D_{l3}|^2(\omega)$ достаточно слабо зависят от ω . Следовательно, полагая ω равной $\omega_0(E)$ (среднему значению $\omega_{0h}(E)$ и $\omega_{0l}(E)$) можно считать, что при таких ω функция $|\varphi_1\rangle$ в основном описывает состояния тяжелых дырок, а функция $|\varphi_3\rangle$ — легких дырок.

Аналогичные исследования мы провели и для дырочных состояний в AlAs. Зависимости $\omega_{0h(l)}(E)$ для AlAs похожи на $\omega_{0h(l)}(E)$ для GaAs, но со сдвигом по энергии на величину ΔE_v , где $\Delta E_v \approx -0.5$ эВ — разрыв валентных зон для гетероструктуры GaAs/AlAs. Следовательно, для интервала энергий от $-\Delta_0$ до E_v зависимость $\omega_{0h(l)}(E)$ для AlAs примерно такая же, как $\omega_{0h(l)}(E)$ для GaAs для интервала энергий от ≈ 0.15 эВ до ≈ 0.5 эВ (правая часть на рис. 1). Из этого рисунка видно, что значения $\omega_{0h(l)}(E)$ для AlAs достаточно сильно отличаются как для состояний тяжелых и легких дырок AlAs, так и тем более от соответствующих значений в GaAs. Вообще говоря, при расчетах можно использовать и различные ω в GaAs и AlAs. Однако в дальнейшем расчеты проводились при значениях ω , допускающих наилучшее разделение состояний легких и тяжелых дырок для данной энергии в GaAs, поскольку состояния в AlAs вносят незначительный вклад в формирование волновой функции всей системы для данных значений энергии.

Перейдем к рассмотрению состояний в квантовых ямах AlAs/GaAs(n)/AlAs(110) при $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$, где n — число слоев в GaAs. Заметим, что термин „квантовая яма“ здесь мы используем не для электронов, а для дырок. Расчет проведен с помощью методики, изложенной в работах [9,10].

Напомним основные идеи данного подхода. В модели с разрывным на границе потенциалом общее решение уравнения Шредингера Ψ^m в среде m ($m = 1, 2$) при

фиксированных значениях E и \mathbf{k}_{\parallel} можно представить в виде

$$\Psi^m = \sum_v C_v^m \Psi_{\mathbf{k}_v}^m, \quad (5)$$

где $\mathbf{k}_v = \mathbf{k}_{\parallel} + \mathbf{k}_{\perp v}$ — волновые векторы для подсистемы m ; $\mathbf{k}_{\perp v}$ — векторы, перпендикулярные границе; $\Psi_{\mathbf{k}_v}^m$ — частные решения уравнения Шредингера для среды m , нумеруемые волновым вектором \mathbf{k}_v . Коэффициенты C_v^m (5) находятся из условий сшивания для коэффициентов C_v^m на гетерограницах и условий на бесконечности. Напомним, что Ψ^m и $\Psi_{\mathbf{k}_v}^m$ — двухкомпонентные спиноры.

Решения Ψ^m также можно представить и в виде

$$\Psi^m = \sum_j F_j^m(z') |\varphi_j^m\rangle.$$

Здесь $F_j^m(z')$ — огибающие для функций $|\varphi_j^m\rangle$ в среде m . Огибающие и их нормальные к гетерограницам производные на гетерограницах должны удовлетворять рассмотренным ранее условиям сшивания для огибающих и также условиям на бесконечности.

При любом подходе мы получаем систему алгебраических уравнений, из условия разрешимости которой находится дискретные уровни энергии в квантовой яме, волновые функции которых стремятся к нулю при $z' \rightarrow \pm\infty$. В дальнейшем будем нумеровать эти уровни по энергии сверху вниз, т.е. первый уровень наиболее близок к E_v GaAs.

Для определения относительного вклада различных состояний в общую электронную плотность запишем условие нормировки для волновых функций состояний в квантовой яме: $\sum_m V^m = 1$, где, имея в виду (5) и (6),

$$V^m = \sum_{v\mu} V_{v\mu}^m = \sum_j V_j^m, \quad (7)$$

$$V_{\mu\nu}^m = (C_\nu^m C_\mu^m) \bullet \int_{\Omega_l} (\Psi_{\mathbf{k}_\nu}^m)^* \Psi_{\mathbf{k}_\mu}^m d\mathbf{r}, \quad (8)$$

$$V_j^m = \int_{\Omega_l} |F_j^m|^2 d\mathbf{r}. \quad (9)$$

Здесь Ω_m — область пространства, занимаемая средой с номером m . Под интегрированием в (8) и (9) понимается интегрирование по пространственным переменным и суммирование по спиновым. Будем считать, что $m = 1$ соответствует области, занимаемой GaAs, $m = 2$ — AlAs. Таким образом, $t^1 = V^1(V^1 + V^2)^{-1}$ есть относительный вклад состояний, локализованных в слоях GaAs, в общую электронную плотность. Ясно, что $V^1 \gg V^2$, т.е. состояния будут в основном локализованы в слоях GaAs, так как данная область энергий в вышеуказанных системах соответствует валентной зоне GaAs и запрещенной зоне AlAs.

Используя соотношения (7) и (8), можно определить относительные вклады состояний легких и тяжелых

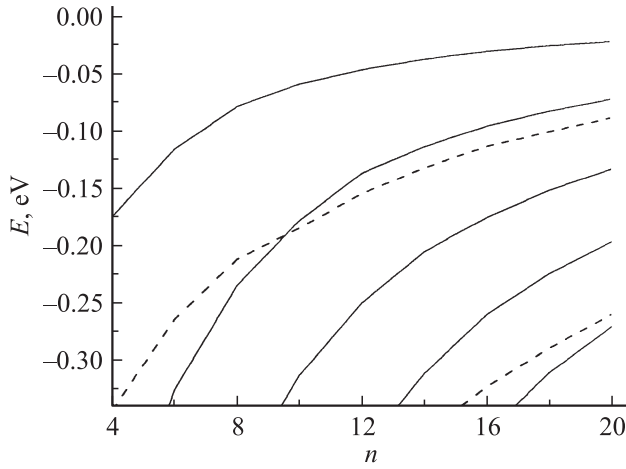


Рис. 2. Зависимость положения уровней энергии в квантовых ямах GaAs(110) от числа слоев n в яме. Состояния, в основном связанные с зоной тяжелых дырок, обозначены сплошными линиями, легких дырок — пунктирными линиями.

дырок в общую электронную плотность. Для этого представим V^m в виде

$$V^m = V_{hh}^m + V_{ll}^m + \tilde{V}^m, \quad (10)$$

где в V_{hh}^m включены слагаемые из (7), для которых оба индекса μ и ν соответствуют состояниям тяжелых дырок (4 слагаемых); V_{ll}^m состоит из слагаемых, относящихся к легким дыркам; в \tilde{V}^m входят все остальные слагаемые в сумме (7). Поскольку наша цель — анализ смешивания состояний легких и тяжелых дырок, далее мы будем интересоваться величинами: $t_{hh(ll)}^m = V_{hh(ll)}^m (V_{hh}^m + V_{hh}^m)^{-1}$, которые описывают относительные вклады состояний тяжелых и легких дырок соответственно в электронную плотность, создаваемую этими состояниями. Для определения относительного вклада в общую электронную плотность других состояний (в основном это вклад от состояний спин-отщепленной зоны) введем величины $\tilde{t}^m = \tilde{V}^m (V^m)^{-1}$. Как показал расчет, для рассматриваемого нами интервала энергий величины \tilde{V}^m достаточно малы по сравнению с V_{hh}^m и V_{ll}^m . Так же рассчитываются величины $t_{1(3)}^m = V_{1(3)}^m (V_1^m + V_3^m)^{-1}$, определяющие относительные вклады огибающих базисных функций $|\varphi_1^m\rangle$ и $|\varphi_3^m\rangle$ в электронную плотность, создаваемую данными состояниями. Ясно, что $t_{hh(ll)}^m \approx t_{1(3)}^m$ при соответствующем выборе параметра ω .

Зависимость уровней энергии состояний в квантовых ямах AlAs/GaAs(n)/AlAs(110) при $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$ от числа слоев n изображена на рис. 2. Как показал расчет волновых функций, некоторые из этих состояний в основном связаны с зоной тяжелых дырок (обозначены сплошными линиями на рис. 2), другие — с зоной легких дырок (обозначены точечными линиями). Отметим, что вследствие операции обращения времени все состояния в квантовой яме при $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$ двукратно вырождены по спину. Поэтому далее мы рассматриваем только состояния симметрии Σ_3 . Кроме энергий и волновых функций,

мы также рассчитывали средние значения спина для состояний в квантовых ямах $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$, как средние соответствующих матриц Паули. Во всех случаях $\sigma_x = -\sigma_y$ и $\sigma_z = 0$. Для состояний симметрии Σ_4 значения спина меняют знак по сравнению с состояниями Σ_3 .

Рассмотрим более подробно результаты для квантовой ямы при $n = 12$. Для вышеуказанного интервала энергии в данной яме имеется четыре энергетических уровня. Практически вся электронная плотность для этих уровней сосредоточена в GaAs ($t^1 = 0.98-0.99$). Как и следовало ожидать, вклад состояний спин-отщепленной зоны \tilde{t}^1 увеличивается при уменьшении энергии. Для данного интервала энергии $0.02 < \tilde{t}^1 < 0.23$.

Первый уровень с энергией $E_1 = -0.0463$ эВ в основном связан с состояниями тяжелых дырок. Расчет проведен при $\omega = 0.4$, при этом $t_{hh}^1 \approx t_1^1 \approx 0.99$, т.е. функция $|\varphi_1\rangle$ почти полностью описывает данное состояние тяжелых дырок. Среднее значение спина $\sigma_x \approx -0.339$, что достаточно близко к объемному значению при соответствующей энергии для зоны тяжелых дырок в GaAs. Уровень с энергией $E_4 = -0.25$ эВ также в основном связан с состояниями тяжелых дырок. Это третий уровень состояний тяжелых дырок, что подтверждается наличием двух нулей в огибающей $F_1(z')$. Расчет проведен при $\omega = 0.137$, при этом $t_{hh}^1 \approx t_1^1 \approx 0.99$. Среднее значение спина $\sigma_x \approx -0.677$, что также достаточно близко к объемному значению для зоны тяжелых дырок в GaAs. Более сложную структуру имеют оставшиеся два состояния в квантовой яме. Как видно из рис. 2, в квантовой яме при $n = 12$ для энергии около -0.14 эВ имеются два близких уровня, один из которых в основном происходит из зоны тяжелых дырок, другой — из зоны легких дырок. Следовательно, в окрестности этой энергии можно предполагать значительное смешивание состояний легких и тяжелых дырок. Расчеты подтверждают это предположение. Состояние с энергией $E_2 = -0.137$ эВ — это в основном состояние тяжелых дырок; для него при $\omega = 0.268$ $t_1^1 \approx t_{hh}^1 \approx 0.73$. Среднее значение спина $\sigma_x \approx -0.352$. Для состояния с энергией $E_3 = -0.154$ эВ $\omega = 0.247$, $t_1^1 \approx t_{hh}^1 \approx 0.28$, $\sigma_x \approx 0.097$. В основном это состояние легких дырок. Средние значения спина для этих двух состояний из-за значительного смешивания заметно отличаются от соответствующих объемных значений. На рис. 3 приведены зависимости $|F_j|^2(z')$ для уровня с энергией E_2 и на рис. 4 — для уровня с энергией E_3 . Сплошными линиями на этих рисунках показаны $|F_1(z')|^2$, пунктирными — $|F_3(z')|^2$. Из приведенных рисунков видно, что состояние с энергией E_2 есть второй уровень состояний тяжелых дырок, а с энергией E_3 — первый уровень состояний легких дырок. Также из этих рисунков видно значительное смешивание дырочных состояний.

На основе полученных данных перейдем к анализу результатов, полученных в работе [8]. Напомним, что в этой работе мы провели расчет коэффициентов прохождения для структуры GaAs/AlAs(6)/GaAs(12)/AlAs(6)/GaAs(110) (в скобках указано число слоев в соот-

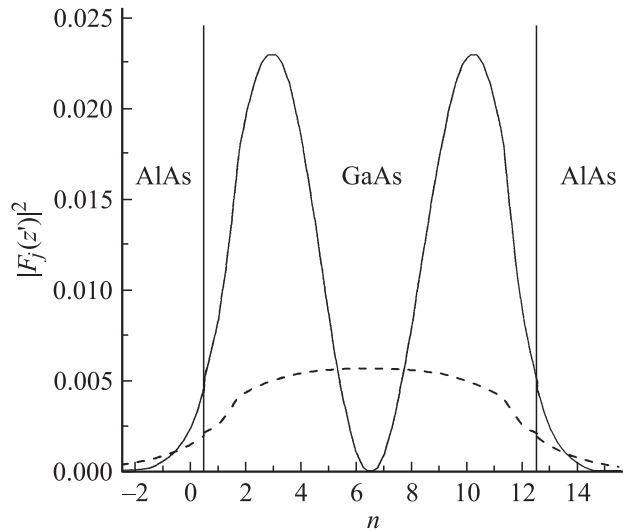


Рис. 3. Зависимости $|F_j|^2(z')$ для второго уровня тяжелых дырок ($E \approx -0.137$ эВ). Сплошными линиями изображены $|F_1|^2(z')$, пунктирными — $|F_3|^2(z')$.

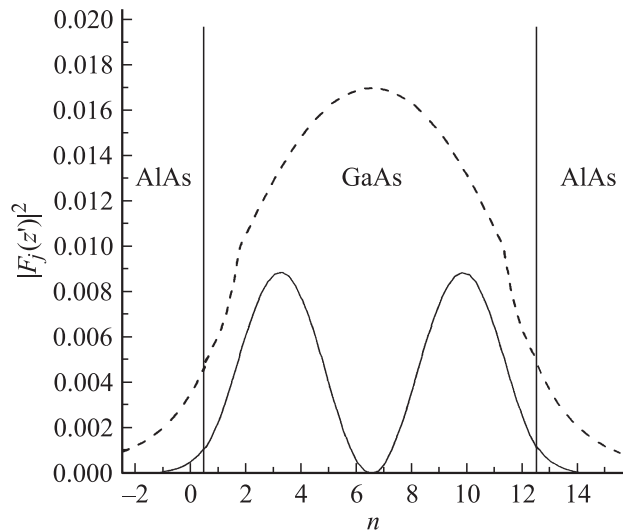


Рис. 4. Зависимости $|F_j|^2(z')$ для первого уровня легких дырок ($E \approx -0.154$ эВ). Сплошными линиями изображены $|F_1|^2(z')$, пунктирными — $F_3^2(z')$.

ветствующих материалах). Результаты этого расчета (рис. 3 в [8]) приведены на рис. 5. Поскольку спиновое расщепление зон мало, то $P_{n1m1} \approx P_{n2m2} \approx P_{nm}$, где $(n, m = h, l)$. Достаточно необычную структуру резонансных пиков в коэффициентах прохождения для энергий вблизи -0.14 эВ можно объяснить значительным смешиванием дырочных состояний. В этой области энергий накладываются друг на друга два резонансных пика, правый пик в основном связан с состояниями тяжелых дырок, а левый — легких дырок. Отметим, что для этих энергий имеются резонансы как в коэффициентах прохождения P_{hh} и P_{ll} , так и в P_{hl} , что также указывает на резонансное смешивание состояний легких и

тяжелых дырок. Два других пика для энергий ~ -0.046 и ~ -0.25 эВ связаны в основном с первым и третьим уровнями для состояний тяжелых дырок в квантовой яме AlAs/GaAs(12)/AlAs(110).

Используя метод расчета [9,10] и полученную систему базисных функций, мы рассчитали состояния в сверхрешетках типа AlAs(m)/GaAs(n). На рис. 6 изображена дисперсия мини-зон для сверхрешетки AlAs(6)/GaAs(12) в

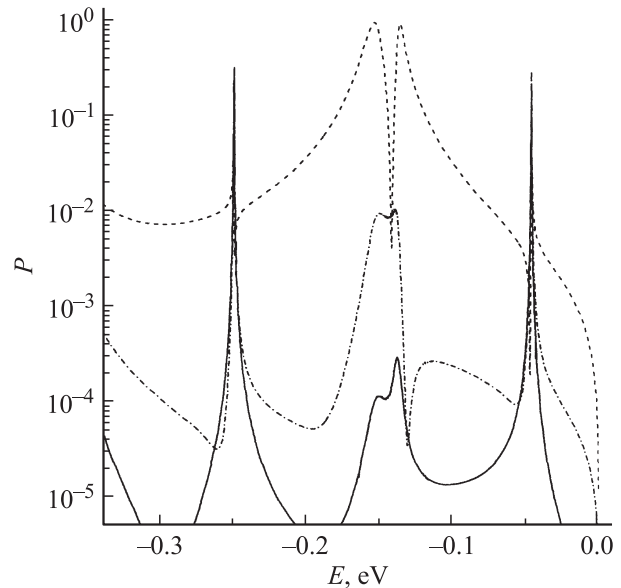


Рис. 5. Коэффициенты прохождения для структуры GaAs/AlAs(6)/GaAs(12)/AlAs(6)/GaAs(110) при $k_{||} = 0$. Сплошной линией обозначена зависимость P_{hh} , штрихпунктирной линией — зависимость P_{hl} , пунктирной линией изображены коэффициенты прохождения P_{ll} .

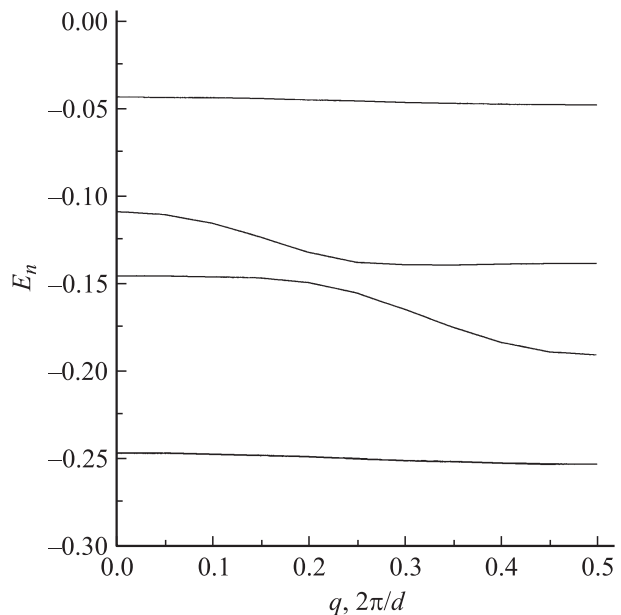


Рис. 6. Дисперсия мини-зон для сверхрешетки AlAs(6)/GaAs(12).

вышеуказанной области энергий для состояний симметрии Σ_3 . Здесь \mathbf{q} — сверхрешеточный вектор в (110)-направлении (в единицах $2\pi/d$, где $d = 2^{-3/2}(m+n)a$ — период сверхрешетки в этом направлении, a — постоянная решетки). Как и в квантовых ямах, будем нумеровать мини-зоны по энергии сверху вниз. Мини-зоны, соответствующие состояниям симметрии Σ_4 , незначительно (на величину спинового расщепления) отличаются от мини-зон, изображенных на рис. 6. Спиновое расщепление зависит от величины q и номера мини-зоны. При $q = 0$ и $q = 0.5$ расщепление отсутствует, наибольшее спиновое расщепление (~ 0.004 эВ) имеет место в окрестности $q = 0.25$ для второй и третьей мини-зон.

Так же, как и для состояний в квантовой яме, можно ввести величины t^1, t_1^1 и t_{hh}^1, \tilde{t}^1 , характеризующие относительный вклад различных состояний, и средние значения спина σ_x . Ясно, что для данной области энергий состояния в основном локализованы в слоях GaAs. Электронная плотность в слоях AlAs зависит от величины затухания волновых функций при удалении от гетерограниц внутрь AlAs. Затухание же волновых функций зависит от энергии и от типа состояний (легкие или тяжелые дырки). Поэтому плотность в слоях AlAs возрастает при уменьшении энергии, а при близких энергиях больше для состояний, связанных в основном с легкими дырками, чем для состояний тяжелых дырок. Очевидно, что чем больше электронная плотность в слоях AlAs, тем сильнее связаны квантовые ямы и тем большую дисперсию имеют соответствующие мини-зоны. Как и для состояний в соответствующей квантовой яме, вклад состояний спин-отщепленной зоны \tilde{t}^1 увеличивается при уменьшении энергии. Для данного интервала энергии $0.02 < \tilde{t}^1 < 0.21$.

Из рис. 6 видно, что первая и четвертая мини-зоны очень слабо зависят от q . Такая дисперсия в этих зонах объясняется тем, что они в основном связаны с состояниями тяжелых дырок (первым и третьим уровнями в квантовой яме AlAs/GaAs(12)/AlAs(110) при $\mathbf{k}_{\parallel} = 0$ соответственно). Найдено, что для первой мини-зоны $t^1 \approx 0.98$, $\omega \approx 0.4$, $t_1^1 \approx t_{hh}^1 \approx 0.99$, $-0.31 < \sigma_x < -0.24$. Для четвертой мини-зоны соответствующие значения равны: $t^1 \approx 0.81$, $\omega \approx 0.14$, $t_1^1 \approx t_{hh}^1 \approx 0.99$, $-0.67 < \sigma_x < -0.65$.

Значительно большая зависимость от q имеет место для второй и третьей мини-зон. Расчет показал, что эти мини-зоны происходят из второго уровня тяжелых дырок и первого уровня легких дырок в квантовой яме AlAs/GaAs(12)/AlAs(110). Близость этих уровней приводит к значительному смешиванию состояний легких и тяжелых дырок в данных мини-зонах, причем смешивание зависит от q . Так, состояния во второй мини-зоне при $q = 0$ в основном связаны с легкими дырками: $\omega \approx 0.304$, $t_1^1 \approx 0.10$, $t_{hh}^1 \approx 0.20$. Существенная разница между t_1^1 и t_{hh}^1 связана с довольно большим различием между ω_0 для состояний легких и тяже-

лых дырок при данной энергии. При увеличении q доля состояний легких дырок во второй мини-зоне уменьшается, а вклад состояний тяжелых дырок увеличивается ($t_1^1 \approx t_{hh}^1 \approx 0.98$ при $q = 0.5$). Значительно меняются и спиновые состояния: от $\sigma_x = 0.19$ при $q = 0$ до $\sigma_x = -0.60$ при $q = 0.5$. Противоположная ситуация наблюдается в третьей мини-зоне: при увеличении q уменьшается вклад состояний тяжелых дырок, а доля состояний легких дырок увеличивается ($t_1^1 \approx t_{hh}^1 \approx 0.95$ при $q = 0$ и $t_1^1 \approx t_{hh}^1 \approx 0.03$ при $q = 0.5$). Так же, как и для второй мини-зоны, имеется существенная зависимость σ_x от q (от $\sigma_x = -0.59$ при $q = 0$ до $\sigma_x = 0.36$ при $q = 0.5$). Полученные результаты показывают, что волновые функции для состояний второй и третьей мини-зон при любых значениях q в основном локализованы в различных областях квантовых ям, а средние значения спина для состояний этих мини-зон имеют существенно различные значения. Можно сказать, что для второй и третьей мини-зон имеется значительное как пространственное, так и спиновое разделение состояний. При $q \approx 0.25$ имеет место так называемое „пересечение зон“. При этом, как уже было отмечено, электронная плотность в AlAs увеличивается при увеличении доли состояний легких дырок в этих мини-зонах (наибольшее значение $t^2 \approx 0.09$ при $q = 0$ второй мини-зоны).

В заключение сформулируем основные новые результаты и выводы данной работы. Для анализа смешивания состояний легких и тяжелых дырок в квантовых ямах и сверхрешетках на основе гетероструктур GaAs/AlAs(110) предложена зависящая от параметра система базисных функций. Найдены зависящие от энергии значения параметра, при которых одна из функций в основном описывает состояния тяжелых дырок, а другая функция — легких дырок. С использованием этих базисных функций рассмотрены состояния в квантовых яме AlAs/GaAs(12)/AlAs(110) и сверхрешетке AlAs(6)/GaAs(12)(110). Для рассмотренного в работе интервала энергии имеются четыре энергетических уровня в данной яме и четыре мини-зоны в сверхрешетке. Анализ показал, что первый и четвертый уровни в яме и первая и четвертая мини-зоны в сверхрешетке в основном связаны с состояниями тяжелых дырок. Средние значения спина для этих состояний достаточно близки к объемному значению при соответствующих энергиях для зоны тяжелых дырок в GaAs. Более сложную структуру имеют оставшиеся два состояния в квантовой яме и вторая и третья мини-зоны в сверхрешетке. Эти состояния в квантовой яме имеют два близких уровня, один из которых в основном происходит из зоны тяжелых дырок, другой — из зоны легких дырок, и имеется заметное смешивание дырочных состояний. Средние значения спина для этих двух состояний заметно отличаются от соответствующих объемных значений. Для второй и третьей мини-зон в сверхрешетке имеет место большая зависимость от q , причем смешивание состояний легких и тяжелых дырок зависит от q . При увеличении q доля состояний

легких дырок во второй мини-зоне уменьшается, а вклад состояний тяжелых дырок увеличивается, для третьей мини-зоны наблюдается противоположная ситуация. Для обеих мини-зон в зависимости от q значительно меняются и спиновые состояния. При $q \approx 0.25$ имеет место так называемое „пересечение зон“. Для этих мини-зон имеется значительное как пространственное, так и спиновое разделение состояний.

Работа выполнена при поддержке Программы поддержки фундаментальных исследований Российского образования, рег. № 01.02.007 01 695.

Список литературы

- [1] J. Xia. Phys. Rev. B, **43**, 9856 (1991).
- [2] S. Nojima. Phys. Rev. B **47**, 13535 (1993).
- [3] Y. Kajikawa. Phys. Rev. B, **51**, 16 790 (1995).
- [4] Г.Ф. Караваев, В.Н. Чернышев, Р.М. Егунов. ФТП, **37** (5), 592 (2003).
- [5] Y. Kajikawa, N. Nishimoto, Y. Higuchi. Phys. Rev. B, **69**, 205 320 (2004).
- [6] S. Dohrmann, D. Hagele, J. Rudolph, M. Bichler, D. Schuh, M. Oestreich. Phys. Rev. Lett., **93**, 147 405 (2004).
- [7] Г.Ф. Караваев, В.Н. Чернышов. Изв. вузов. Физика, N 6, 51 (2003).
- [8] Г.Ф. Караваев, В.Н. Чернышов. ФТП, **40** (5), 549 (2006).
- [9] Г.Ф. Караваев, В.Н. Чернышов. ФТП, **35** (7), 841 (2001).
- [10] Г.Ф. Караваев, В.Н. Чернышов, Р.М. Егунов. ФТП, **36** (5), 558 (2002).

Редактор Л.В. Беляков

Mixing of hole states in heterostructures GaAs/AlAs(110)

V.N. Chernyshov

Siberian Physical Technical Institute,
634050 Tomsk, Russia
Tomsk Polytechnical University,
634050 Tomsk, Russia

Abstract There are considered the states in quantum well AlAs/GaAs(12)/AlAs(110) and in superlattice AlAs(6)/GaAs(12)(110). A system of basic functions dependent on a parameter is offered for the analysis of mixing states of light and heavy holes in these structures. The values of the parameter at which the functions basically describes states of heavy and light holes are found. There were found four levels in the given well for the considered energy interval and accordingly four minibands in the superlattice. The analysis has shown that the first and the fourth levels in the well, and similarly both the first and the fourth minibands in the superlattice are basically connected to heavy holes states. Another two states in a quantum well both the second and the third minibands in the superlattice for which there is an appreciable mixing of hole states have more complex structure. For these minibands there are significant both spatial, and spin division of states.