

Федеральное агентство по образованию
САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ
ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ

Приоритетный национальный проект «Образование»
Инновационная образовательная программа
Санкт-Петербургского государственного политехнического университета

**РАЗМЕРНОЕ КВАНТОВАНИЕ.
ЧАСТЬ 1. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР
НАНОСТРУКТУР**

Под редакцией *С. Н. Лыкова*

*Рекомендовано Учебно-методическим объединением
по университетскому политехническому образованию
в качестве учебного пособия для студентов
высших учебных заведений, обучающихся по направлению
подготовки «Техническая физика»*

Санкт-Петербург
Издательство Политехнического университета
2008

УДК 530.145 (075.8)

ББК 22.37я73

Г22

Рецензенты:

Академик РАН, зав. сектором теоретических основ микроэлектроники
ФТИ им. А. Ф. Иоффе РАН *Р. А. Сурис*

Доктор физико-математических наук, профессор СПбГУ *Б. В. Новиков*

Авторы:

*В. Э. Гасумянц, С. Н. Лыков, Д. А. Пшенай-Северин,
С. А. Рыков, Д. А. Фирсов*

Гасумянц В. Э. Размерное квантование. Часть 1. Энергетический спектр наноструктур : учеб. пособие / В. Э. Гасумянц [и др.] ; под ред. С. Н. Лыкова. – СПб.: Изд-во Политехн. ун-та, 2009. – 258 с.

Рассмотрены основные физические свойства систем с пониженной размерностью – полупроводниковых наноструктур. Пояснены способы и методы применения квантовомеханической теории к описанию энергетического спектра низкоразмерных систем, приведены примеры решения конкретных задач, возникающих как при описании процессов, происходящих в данных системах, так и при проектировании приборов на их основе. Решения проиллюстрированы результатами численных расчетов с использованием параметров полупроводниковых материалов, применяемых в настоящее время для создания низкоразмерных структур. Изложены такие разделы физики низкоразмерных систем как общие особенности энергетического спектра в структурах с пониженной размерностью, плотность состояний и статистика электронов, влияние на энергетический спектр непараболичности, сложной структуры валентной зоны, анизотропии и наличия в структурах внутренних напряжений.

Предназначено для студентов высших учебных заведений, обучающихся по направлению подготовки 140400 «Техническая физика». Может быть использовано для подготовки студентов по направлению «Электроника и микроэлектроника», а также аспирантами, инженерами и научными работниками, специализирующимися в области опто- и наноэлектроники.

Работа выполнена в рамках реализации Инновационной образовательной программы Санкт-Петербургского государственного политехнического университета «Развитие политехнической системы подготовки кадров в инновационной среде науки и высокотехнологических производств Северо-Западного региона России».

Печатается по решению редакционно-издательского совета Санкт-Петербургского государственного политехнического университета.

© Санкт-Петербургский государственный
политехнический университет, 2008

ISBN 978-5-7422-2269-9

ОГЛАВЛЕНИЕ

Введение.....	5
1. Структуры с пониженной размерностью.....	7
1.1. Квантование энергии в твердотельных структурах.....	7
1.2. Квантовые ямы.....	9
1.2.1. Прямоугольная потенциальная яма с бесконечно высокими стенками.....	11
1.2.2. Симметричная яма со стенками конечной высоты.....	17
1.2.3. Несимметричная яма с прямоугольным рельефом.....	31
1.2.4. Квантовая яма с линейно изменяющимся потенциалом.....	35
1.2.5. Квантовая яма с экспоненциальным рельефом.....	40
1.3. Туннельно-связанные квантовые ямы.....	44
1.4. Квантовые нити и точки.....	51
1.4.1. Прямоугольная нить и точка с бесконечными барьерами.....	52
1.4.2. Цилиндрическая квантовая нить.....	56
1.4.3. Сферическая квантовая точка.....	62
1.4.4. Параболическая квантовая точка.....	66
1.5. Метод матриц переноса.....	68
1.5.1. Определение матрицы переноса.....	68
1.5.2. Движение электрона в поле прямоугольного барьера.....	74
1.5.3. Отражение электрона от потенциальной ямы.....	77
1.5.4. Квантование энергии электрона в потенциальной яме.....	78
1.6. Резонансное туннелирование.....	80
1.7. Сверхрешетки.....	88
1.8. Плотность состояний и статистика электронов в системах с пониженной размерностью.....	95
1.8.1. Плотность состояний в трехмерном кристалле.....	96
1.8.2. Плотность состояний в двумерной квантовой яме.....	98
1.8.3. Плотность состояний в одномерной нити.....	100
1.8.4. Плотность состояний в квантовой точке.....	101
1.8.5. Плотность состояний в сверхрешетке.....	102
1.8.6. Концентрация носителей заряда в квантовой яме.....	104
2. Размерное квантование в структурах со сложным зонным спектром.....	108

2.1. Определение квантовых состояний электрона в периодическом поле кристалла.....	108
2.1.1. Уравнение Шредингера для волновых функций Блоха.....	108
2.1.2. Метод <i>kp</i> -возмущений.....	113
2.1.3. Спин-орбитальное расщепление зон.....	121
2.1.4. Гамильтониан модели Кейна.....	132
2.1.5. Непараболичность зон в модели Кейна.....	143
2.1.6. Гамильтониан Латтинжера.....	160
2.2. Метод огибающих функций в задачах о размерном квантовании энергии электронов в гетероструктурах.....	165
2.3. Размерное квантование электронных состояний с учетом кейновской непараболичности.....	172
2.3.1. Уравнения для огибающих функций в модели Кейна.....	172
2.3.2. Метод матрицы переноса в многозонной модели.....	176
2.3.3. Влияние непараболичности на подзоны квантовой ямы.....	181
2.3.4. Пограничные состояния в модели Кейна.....	186
2.3.5. Размерно-квантованные состояния дырок в трехзонной модели Кейна.....	190
2.4. Трансформация легких и тяжелых дырок.....	195
2.4.1. Прямоугольная бесконечная яма в модели Латтинжера.....	195
2.4.2. Квантовая яма с конечными барьерами в модели Латтинжера	205
2.5. Интерфейсные состояния в гетероструктуре с бесщелевым полупроводником.....	209
2.6. Размерное квантование в анизотропной энергетической зоне.....	218
2.6.1. Уравнения размерного квантования энергии в многодолинной зоне проводимости.....	218
2.6.2. Прямоугольная бесконечная яма с анизотропной зоной проводимости.....	223
2.6.3. Инверсионный слой в кремнии <i>p</i> -типа.....	229
2.6.4. Структуры с барьерами конечной высоты	230
2.7. Напряженные гетероструктуры.....	233
2.7.1. Тензор упругой деформации псевдоморфного слоя.....	235
2.7.2. Гамильтониан Бира–Пикуса.....	244
2.7.3. Пьезоэлектрический эффект.....	252
Библиографический список.....	256

ВВЕДЕНИЕ

Важной составляющей современной физики полупроводников является сравнительно новое, активно развивающееся направление – физика систем пониженной размерности. К полупроводниковым низкоразмерным системам относятся, в первую очередь, разнообразные наноструктуры – сверхрешетки, структуры с квантовыми ямами, системы квантовых нитей и точек, практическая разработка которых поддерживается постоянно возрастающими возможностями новых технологий. Наряду с тем, что такие структуры уже служат элементной базой современной микро и наноэлектроники, они являются объектами перспективных исследований по созданию принципиально новых квантовых устройств (приборов спинтроники, квантовых компьютеров).

В формировании уникальных физических свойств наноструктур ключевую роль играет эффект размерного квантования энергии. Цель настоящего учебного пособия заключается в подробном рассмотрении этого эффекта. На популярном уровне изложения размерное квантование энергии электронов в наноструктурах представляется относительно простым явлением – оно имеет ту же природу, что и дискретность энергетического спектра атома, объясняемая квантовой механикой. Согласно квантовой теории электрон обладает свойствами волны, а атом служит «резонатором», выделяющим из непрерывного множества волновых частот определенные, дискретные значения частоты. В квантовой механике частота, умноженная на постоянную Планка, есть энергия; так возникает картина дискретных уровней энергии атома. С этой точки зрения наноструктура (например, квантовая точка – островок одного полупроводникового материала в толще или на поверхности другого материала) подобна искусственному атому с дискретным спектром

энергии. Свойства природных нанобъектов (атомов, молекул) невозможно изменить, тогда как в случае искусственных наноструктур легко удастся варьировать состав полупроводниковых соединений, менять размеры и форму нанобъекта, концентрацию электронов в нем, конструируя тем самым структуру с заранее заданными физическими параметрами. Инженерный подход к этой интересной и актуальной задаче требует предварительного проведения квантово-механических расчетов, которые выходят за рамки элементарных представлений. В профессиональных вычислениях применяются сложные теоретические методы, высокопроизводительные компьютеры и специализированные программы. Такой уровень в пособии не может быть достигнут, но, тем не менее, здесь представлены темы разной степени сложности. В первой главе приведены сравнительно простые расчеты энергетического спектра наноструктур в однозонном подходе; во второй главе рассматриваются приближенные к реальности многозонные модели.

Для работы с пособием необходимо знать основы квантовой механики и физики полупроводников. Источником полезной информации по указанным дисциплинам и по теме пособия являются книги [1–8].

Учебное пособие предназначено студентам старших курсов физических факультетов, аспирантам, преподавателям, а также всем желающим получить представление об энергетическом спектре электронов в низкоразмерных системах, применяемых в нанoeлектронике.

Рукопись подготовлена в порядке продолжения серии монографий-учебных пособий «Квантовая физика твердых тел и размерных структур» под общей редакцией В. И. Ильина и И. П. Ипатовой в рамках Федеральной целевой программы «Государственная поддержка интеграции высшего образования и фундаментальной науки на 2002 – 2006 годы».

1. СТРУКТУРЫ С ПОНИЖЕННОЙ РАЗМЕРНОСТЬЮ

Изучение квантово-размерных структур мы начнем с самых простых примеров, в которых электроны проводимости полупроводникового материала обладают параболическим законом дисперсии $E = p^2/(2m)$ с эффективной массой m . Будут вычислены огибающие блоховских волновых функций и энергетический спектр электронов в многослойных структурах, изготовленных из материалов различного состава. С этой целью рассматриваются решения уравнения Шредингера с зависящей от состава эффективной массой m и с потенциалом U , повторяющим ступенчатый рельеф дна зоны проводимости. Аналогичным образом можно изучать состояния дырок в валентной зоне структуры с гетеропереходами. Основу такого подхода составляет метод эффективной массы в однозонном приближении; он позволяет выявить главные качественные черты энергетического спектра разнообразных квантово-размерных структур. Уточнения, обусловленные сложным строением энергетических зон реальных полупроводниковых материалов, рассматриваются в разделе 2.

1.1. КВАНТОВАНИЕ ЭНЕРГИИ В НАНОСТРУКТУРАХ

Физические свойства твердого тела определяются картиной взаимодействия входящих в его состав частиц – электронов и атомных ядер. Движение частиц всегда подчинено законам квантовой механики [1]. Одно из самых важных проявлений квантовых законов заключается в том, что энергетический спектр частицы, движущейся в ограниченном объеме, состоит из дискретных уровней. Этот факт легко пояснить на основе представления о волновой функции частицы с импульсом p , характеризующейся длиной волны де Бройля $\lambda = 2\pi\hbar/p$. Действительно, если движение электрона ограничено областью пространства с линейным размером L , то вне этой области волновая функция обращается в ноль, а внутри она с необходимостью имеет *целое* число узлов. Другими словами, на длине L укладывается целое число половинок длины волны, так что импульс может принимать лишь *дискретные* значения: $p = \pi\hbar n/L$, где

$n = 1, 2, \dots$. Подставляя эти значения p в формулу для энергии $E = p^2/(2m)$ электрона с эффективной массой m , мы найдем, что энергетический спектр является дискретным, причем зазор между нижними уровнями энергии составляет

$$\Delta E = \frac{3\pi^2}{2} \frac{\hbar^2}{mL^2}. \quad (1.1)$$

Линейные размеры L макроскопических тел намного превышают атомную единицу длины – радиус Бора $a_B \sim 10^{-1}$ нм. Если размеры тела заметно превосходят нанометровый масштаб, то в большинстве задач дискретностью энергии можно пренебрегать. Например, пусть речь идет об энергии электрона в зоне проводимости полупроводника с эффективной массой m порядка массы электрона m_0 в вакууме, причем размер образца по всем направлениям имеет микронный масштаб ($L \sim 10^3$ нм $\sim 10^4 a_B$). Тогда масштаб дискретности энергии (1.1) составит всего $\Delta E \sim 10^{-6}$ эВ, что намного меньше энергии тепловых флуктуаций $k_B T$ при любой температуре образца в обычных условиях; здесь и далее k_B – постоянная Больцмана, T – абсолютная температура. При $\Delta E \ll k_B T$ взаимодействие с тепловыми колебаниями кристаллической решетки разбрасывает электроны по чрезвычайно большому числу дискретных уровней энергии, и в этом случае можно с приемлемой точностью считать, что энергетический спектр электрона описывается формулой $E = p^2/(2m)$ с непрерывными значениями импульса p . Чем больше размеры образца, тем лучше оправдывается представление о непрерывном энергетическом спектре.

Теперь уменьшим толщину образца в одном из направлений, например, вдоль оси z , до значений $L_z \sim 10$ нм. Это приведет к резкому увеличению (в 10^4 раз – по закону $1/L_z^2$) интервала ΔE между уровнями энергии, соответствующими движению электрона вдоль оси z . Если, к тому же, взять полупроводниковый материал с малой эффективной массой электрона, $m \ll m_0$, то в широком диапазоне температуры можно добиться выполнения неравенства

$$\Delta E \gg k_B T. \quad (1.2)$$

В таких условиях тепловые колебания решетки, как и любые внешние возмущения с энергией, малой по сравнению с ΔE , не приводят к переходам электрона между уровнями, отвечающими разным состояниям движения вдоль оси z . Другими словами, электрон в достаточно тонкой пленке «утрачивает» степень свободы, связанную с движением поперек этой пленки. В то же время движение в двух оставшихся измерениях (в плоскости x, y) при больших размерах L_x и L_y сохраняет свой непрерывный характер. Поэтому можно сказать, что в данном примере мы имеем дело с *двумерной* системой электронов, заключенных в квантовой яме. Подобным же образом в квантовой нити – проводнике вытянутой формы с достаточно малыми поперечными размерами – квантование энергии становится существенным уже для двух степеней свободы электрона, а движение с непрерывным спектром энергии оказывается *одномерным*. Наконец, в так называемой квантовой точке условие существенной дискретности энергетического спектра (1.1) выполняется для всех трех орбитальных степеней свободы электрона; в этом смысле квантовая точка может быть названа нульмерной системой. Квантовые ямы, нити и точки составляют элементную основу для построения более сложных структур полупроводниковой наноэлектроники. Такие объекты принято называть квантово-размерными структурами или структурами с пониженной размерностью.

1.2. КВАНТОВЫЕ ЯМЫ

Наиболее простым примером структуры с квантовой ямой служит тонкая проводящая пленка (рис. 1.1, *a*). Поскольку носители заряда (электроны в зоне проводимости) движутся внутри пленки, не покидая ее, естественно рассматривать область пространства, занятую пленкой, как потенциальную яму с высотой стенок, равной работе выхода электронов (порядка нескольких эВ). Толщина L_z такой ямы совпадает с толщиной пленки.

Другой пример – МДП-структура, представляющая собой систему слоев «металл–диэлектрик–полупроводник», где для электронов в поверхностной области полупроводника, граничащей с диэлектриком, образуется потенциальная яма, обусловленная изгибом дна зоны

проводимости под действием приложенного извне электрического напряжения (рис. 1.1, б). В этом случае потенциальный рельеф ямы легко изменять, управляя разностью потенциалов между металлическим и полупроводниковым электродами. Еще один пример (рис. 1.1, в), по своему характеру близкий к первому, – двойной гетеропереход, в котором тонкий слой полупроводника с относительно малой запрещенной зоной (узкозонный материал) с обеих сторон окружен толстыми слоями полупроводника с большей величиной запрещенной зоны (широкозонный материал). В рассматриваемом примере слой узкозонного материала является потенциальной ямой для электронов; высота ее энергетических барьеров определяется разрывом зон – разностью уровней дна зоны проводимости в граничащих друг с другом полупроводниках. Для дырок в узкозонном материале также существует потенциальная яма; ее рельеф обусловлен разрывами края валентной зоны. Изменяя количество слоев, их толщину и состав, можно с успехом управлять формой потенциального рельефа, концентрацией носителей заряда в квантовых ямах и другими физическими характеристиками гетероструктур.

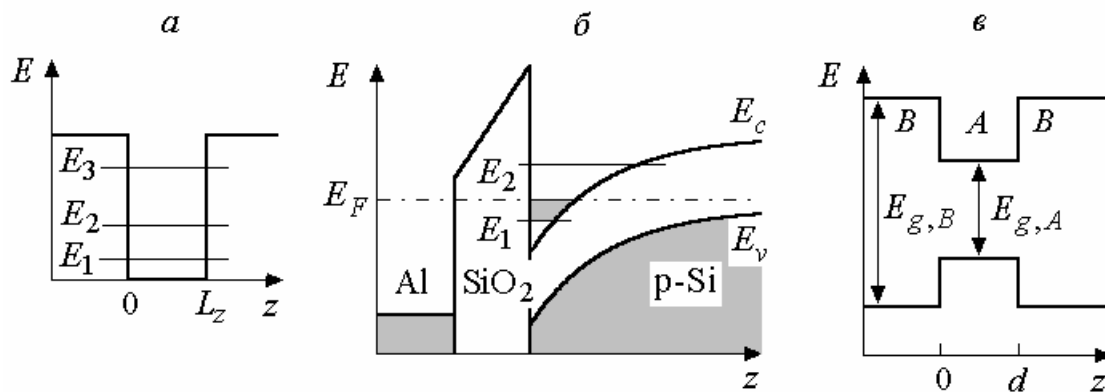


Рис. 1.1. Примеры квантовых ям.

a – прямоугольная потенциальная яма с барьерами конечной высоты для электронов в тонкой проводящей пленке; схематично показаны уровни энергии E_n , обусловленные размерным квантованием в направлении, перпендикулярном плоскости пленки; *б* – энергетическая диаграмма МДП-структуры Al–SiO₂–p-Si с положительным потенциалом на металлическом электроде; области, занятые электронами, на этом рисунке выделены темным цветом; *в* – энергетическая диаграмма двойного гетероперехода, состоящего из материалов А и В. Материал В с большей запрещенной зоной $E_{g,B}$ является барьером для носителей заряда в материале А с меньшей запрещенной зоной $E_{g,A}$.

Перейдем к примерам количественного анализа энергетического спектра и волновых функций электронов в различных моделях квантовых ям.

1.2.1. Прямоугольная потенциальная яма с бесконечно высокими стенками

Если характерные значения энергии электронов в квантовой яме малы по сравнению с величиной энергетических барьеров, то для простоты можно считать барьеры бесконечно высокими. Вне ямы, в области бесконечных потенциальных барьеров, волновая функция электрона $f(\mathbf{r})$ должна быть равна нулю. Внутри ямы волновая функция, описывающая стационарное состояние с энергией E , удовлетворяет уравнению Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 f(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})f(\mathbf{r}) = E f(\mathbf{r}) \quad (1.3)$$

с потенциалом $U(\mathbf{r})$, характеризующим рельеф края зоны проводимости в квантовой яме. Говоря более строго, здесь $f(\mathbf{r})$ – не вся волновая функция, а только огибающая блоховской волновой функции электрона в кристалле; это понятие подробно обсуждается в разделе 2.

В простейшей модели, с потенциальным рельефом прямоугольной формы, потенциал $U(\mathbf{r})$ внутри ямы равен постоянной величине E_c – это уровень края зоны проводимости в рассматриваемом полупроводниковом материале. Пусть, кроме того, образец полупроводника имеет вид прямоугольного параллелепипеда с ребрами длиной L_x , L_y , L_z . Тогда решение уравнения Шредингера (1.3) легко получить методом разделения переменных в декартовых координатах.

Действительно, будем искать волновую функцию стационарного состояния $f(\mathbf{r})$ в форме произведения трех неизвестных функций, каждая из которых зависит только от одной из координатных переменных x , y , z :

$$f(\mathbf{r}) = \chi(x)\varphi(y)\psi(z) . \quad (1.4)$$

Подставляя такое произведение в (1.3), и учитывая, что в декартовых координатах

$$\nabla^2 f = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial z^2}, \quad (1.5)$$

получим:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\varphi\psi \frac{d^2\chi}{dx^2} + \chi\psi \frac{d^2\varphi}{dy^2} + \chi\varphi \frac{d^2\psi}{dz^2} \right) + E_c \chi\varphi\psi = E \chi\varphi\psi. \quad (1.6)$$

Уравнение (1.6) обращается в тождество, если в качестве функций χ , φ и ψ взять решения соответствующих одномерных уравнений Шредингера,

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\chi(x)}{dx^2} = E^{(x)} \chi(x), \quad (1.7)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\varphi(y)}{dy^2} = E^{(y)} \varphi(y), \quad (1.8)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(z)}{dz^2} = E^{(z)} \psi(z), \quad (1.9)$$

и положить в (1.6)

$$E = E^{(x)} + E^{(y)} + E^{(z)} + E_c. \quad (1.10)$$

Таким образом, движение электрона вдоль осей x , y или z описывается одномерными волновыми функциями, причем каждая из этих трех степеней свободы дает аддитивный вклад в полную энергию стационарного состояния электрона E . Край зоны проводимости E_c в (1.10) играет роль начала отсчета электронной энергии (часто бывает удобным полагать $E_c = 0$).

Решим уравнения (1.7)–(1.9), начав с последнего из них. Как известно, линейное дифференциальное уравнение второго порядка имеет два частных линейно независимых решения, а общее решение равно сумме частных решений, взятых с произвольными постоянными

коэффициентами. Частные решения уравнения (1.9) можно выбрать в виде двух плоских волн с противоположными знаками импульса $\hbar k_z$. Тогда общее решение запишется в виде

$$\psi(z) = A \exp(ik_z z) + B \exp(-ik_z z), \quad (1.11)$$

где коэффициенты A , B и z -компонента волнового вектора k_z пока представляют собой произвольные постоянные. Функция (1.11) удовлетворяет уравнению (1.9), если справедливо равенство

$$E^{(z)} = \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}. \quad (1.12)$$

Учтем теперь требование непрерывности решений уравнения Шредингера. Происхождение такого требования можно пояснить следующим образом. Если потенциал $U(\mathbf{r})$ в уравнении (1.3) конечен, то конечными будут также члены $U(\mathbf{r})f(\mathbf{r})$ и $Ef(\mathbf{r})$. Тогда уравнение (1.3) может быть верным равенством лишь с конечными вторыми производными волновой функции, входящими в $\nabla^2 f$, а для этого необходима непрерывность первых производных. В свою очередь, для существования непрерывных первых производных функции $f(\mathbf{r})$ требуется непрерывность самой $f(\mathbf{r})$ (поскольку производная функции стремится к бесконечности там, где функция испытывает скачок). Таким образом, если потенциал в уравнении Шредингера (1.3) конечен, то волновая функция и ее первые производные должны быть непрерывными. Но если высота стенок потенциальной ямы стремится к бесконечности, требование конечности $\nabla^2 f$ на стенках ямы снимается. В этом случае первые производные волновой функции будут на стенках ямы испытывать скачок, и сохраняется только свойство непрерывности самой волновой функции (1.4).

Вне квантовой ямы $f = 0$, поэтому на стенках ямы (при $z = 0$ и $z = L_z$) волновая функция $\psi(z)$ непрерывно обращается в нуль:

$$\psi(0) = 0, \quad \psi(L_z) = 0. \quad (1.13)$$

Первое из граничных условий (1.13) ведет к тому, что в выражении (1.11) $B = -A$, так что волновую функцию (1.11) можно представить в виде

$$\psi(z) = C \sin(k_z z), \quad (1.14)$$

где $C \neq 0$ – произвольный нормировочный множитель. Тогда второе из двух условий (1.13) приводит к уравнению для z -компоненты волнового вектора,

$$\sin(k_z L_z) = 0, \quad (1.15)$$

и тем самым к ее квантованию:

$$k_z = \frac{\pi}{L_z} n_z, \quad n_z = 1, 2, 3, \dots \quad (1.16)$$

В формуле (1.16) учитываются только те значения квантового числа n_z , которым отвечает набор линейно независимых функций (1.14) (значения $0, -1, -2, \dots$ отброшены). Подстановка (1.16) в (1.12) дает выражение для уровней энергии, соответствующих движению электрона вдоль оси z :

$$E_{n_z}^{(z)} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL_z^2} n_z^2, \quad n_z = 1, 2, 3, \dots \quad (1.17)$$

Здесь и далее мы будем считать, что ось z выбрана в направлении, поперечном к плоскости квантовой ямы, так что именно в этом направлении реализуется размерное квантование энергии, характеризующееся неравенством (1.2).

Аналогичным образом можно записать и решения уравнений (1.7)–(1.8): дело сводится к замене символа z символами x или y . Но поскольку размерное квантование в направлениях x и y при больших размерах L_x, L_y

не является существенным, вместо синусоидальных решений уравнений (1.7) и (1.8) удобно выбрать непосредственно плоские волны

$$\chi(x) = \exp(ik_x x), \quad \varphi(y) = \exp(ik_y y) \quad (1.18)$$

с непрерывным спектром энергии

$$E^{(x)} = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m}, \quad E^{(y)} = \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m}. \quad (1.19)$$

Функции (1.18) нигде не обращаются в ноль и поэтому относятся к картине с бесконечными размерами пленки L_x, L_y . Дискретность квантовых состояний, возникающую в случае конечных размеров L_x, L_y , при необходимости легко учесть, заменяя реальные граничные условия требованием периодичности функций (1.18)

$$\chi(x) = \chi(x + L_x), \quad \varphi(y) = \varphi(y + L_y), \quad (1.20)$$

что приводит к квантованию проекций волнового вектора k_x, k_y :

$$k_x = \frac{2\pi}{L_x} n_x, \quad k_y = \frac{2\pi}{L_y} n_y, \quad n_x, n_y = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (1.21)$$

Свобода в выборе граничных условий для направлений x, y допустима в связи с тем, что в реальном образце с большими размерами L_x, L_y электрон, движущийся вдоль пленки, рано или поздно испытывает рассеяние на каких-либо дефектах кристаллической структуры. Если длина свободного пробега электронов мала по сравнению с L_x, L_y , то детальный учет влияния далеких границ на вид волновых функций $\chi(x), \varphi(y)$ перестает быть актуальным; при этом в качестве базисных функций удобно брать плоские волны (1.18) с граничными условиями (1.20) – такой выбор отличается математической простотой.

Таким образом, в прямоугольной квантовой яме с бесконечно высокими барьерами, стационарные состояния электрона можно описывать волновыми функциями вида

$$f(\mathbf{r}) = C e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}_{\parallel}} \sin\left(\frac{\pi n z}{L_z}\right), \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (1.22)$$

где \mathbf{K} – двумерный волновой вектор (с компонентами k_x, k_y) в плоскости пленки, \mathbf{r}_{\parallel} – продольная по отношению к плоскости пленки часть радиус-вектора, так что

$$\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}_{\parallel} = k_x x + k_y y. \quad (1.23)$$

Нормировочный коэффициент C , определяемый интегралом квадрата модуля волновой функции по объему образца $\Omega = L_x L_y L_z$,

$$\int_{\Omega} d^3\mathbf{r} |f(\mathbf{r})|^2 = 1, \quad (1.24)$$

равен $C = \sqrt{2/\Omega}$. Энергетический спектр электрона, как видно из выражений (1.10), (1.17), (1.19), дается формулой

$$E_n(K) = E_c + \frac{\hbar^2 K^2}{2m} + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m L_z^2} n^2, \quad (1.25)$$

где $K^2 = k_x^2 + k_y^2$, $n = 1, 2, 3, \dots$. Эта формула показывает, что спектр энергии электрона состоит из *подзон* размерного квантования, пронумерованных квантовым числом n . В каждой подзоне энергия обладает параболической (квадратичной) зависимостью от двумерного волнового вектора \mathbf{K} (рис. 1.2).

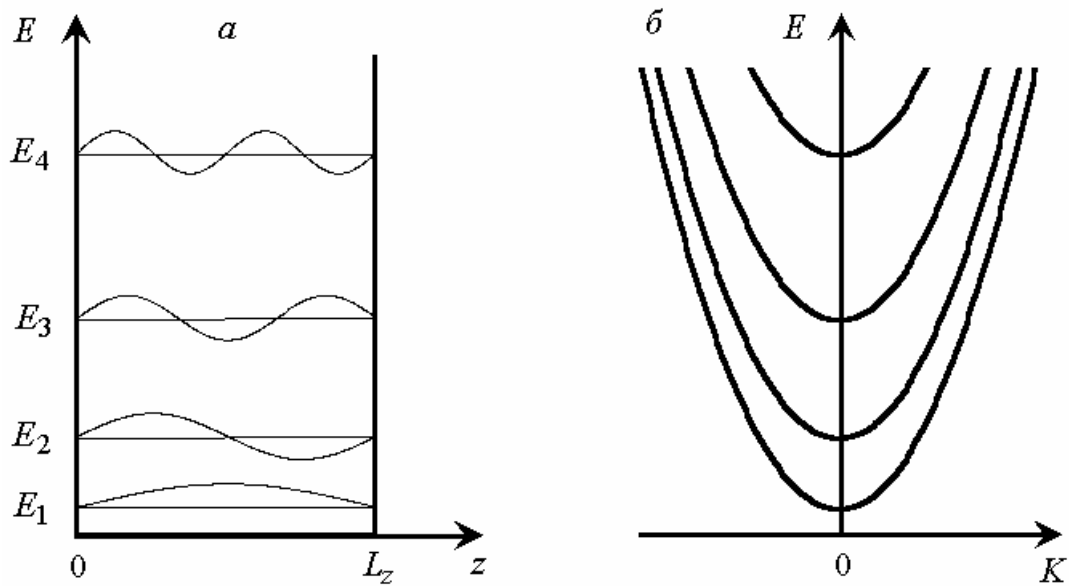


Рис. 1.2. Электронные состояния в прямоугольной квантовой яме. a – горизонтальными прямыми показаны энергетические уровни E_n электрона в потенциальной яме с бесконечными стенками, найденные по формуле (1.25) при $K = 0$ (и $E_c = 0$). Для каждого уровня E_n приведен график волновой функции $\psi_n(z)$. b – подзоны размерного квантования $E_n(K)$, где $K = (k_x^2 + k_y^2)^{1/2}$.

1.2.2. Симметричная яма со стенками конечной высоты

Рассмотрим электронные состояния в зоне проводимости двойной гетероструктуры, показанной на рис. 1.1, b . Волновые функции стационарных состояний определяются уравнением Шредингера (1.3), в котором теперь значения координаты z не ограничены толщиной квантовой ямы d , причем как потенциал U , так и эффективная масса m электрона зависят от z :

$$U(z) = \begin{cases} E_{c,A} & \text{при } 0 \leq z \leq d, \\ E_{c,B} & \text{при } z < 0, z > d, \end{cases} \quad m(z) = \begin{cases} m_A & \text{при } 0 \leq z \leq d, \\ m_B & \text{при } z < 0, z > d. \end{cases} \quad (1.26)$$

Здесь и далее индексом А отмечаются параметры зоны проводимости в узкозонном материале (область квантовой ямы): $E_{c,A}$ – положение края зоны проводимости, m_A – эффективная масса. В широкозонном материале (область потенциальных барьеров) эти параметры отмечаются индексом В;

d – толщина ямы в направлении размерного квантования (направление оси z). Обычно полупроводниковый материал с большей запрещенной зоной характеризуется большей эффективной массой электронов, так что $m_B > m_A$; объяснение этому правилу дано в разделе 2.

Как и в предыдущей задаче, воспользуемся методом разделения переменных. При каждом фиксированном значении координаты z рассматриваемая структура в направлениях x и y однородна – в этих направлениях потенциал U обладает трансляционной симметрией. Поэтому ту часть волновой функции, которая зависит только от координат x и y , по-прежнему можно выбрать в виде плоской волны с двумерным волновым вектором \mathbf{K} . Подставив в уравнение (1.3) выражение для волновой функции $f(\mathbf{r})$ в форме

$$f(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}_{\parallel}} \psi(z), \quad (1.27)$$

мы приходим к уравнению Шредингера для волновой функции $\psi(z)$ одномерного движения электрона в направлении, поперечном к плоскости квантовой ямы:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dz^2} + \frac{\hbar^2 K^2}{2m} \psi + U \psi = E \psi. \quad (1.28)$$

В этом уравнении m и U представляют собой кусочно-постоянные функции (1.26), так что уравнение следует решить отдельно для областей А и В, а затем надо «сшить» решения на границах областей с помощью некоторых граничных условий.

Физически обоснованный выбор граничных условий здесь сделать сложно, так как метод эффективной массы теряет применимость в области резкого гетероперехода (толщиной порядка атомных размеров), причем истинный вид кристаллического потенциала «на стыке» двух материалов практически никогда не известен. Тем не менее, как показывает опыт, выбор граничных условий из следующих формальных соображений ведет к качественно приемлемым результатам. Изменим уравнение (1.28), внося эффективную массу в первом слагаемом под знак производной:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{m} \frac{d\psi}{dz} \right) + \frac{\hbar^2 K^2}{2m} \psi + U \psi = E \psi. \quad (1.29)$$

Внутри областей А и В, где эффективная масса постоянна, уравнения (1.28) и (1.29) взаимно эквивалентны. Каждое из них можно представить в форме

$$\hat{H}\psi = E\psi,$$

однако с учетом зависимости массы от переменной z гамильтониан \hat{H} уравнения (1.28) не является эрмитовым оператором, тогда как гамильтониан уравнения (1.29)

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} \left(\frac{1}{m} \frac{d}{dz} \right) + \frac{\hbar^2 K^2}{2m} + U \quad (1.30)$$

обладает свойством эрмитовости. Последнее означает, что матричные элементы оператора (1.30) удовлетворяют равенству $H_{nn'} = H_{n'n}^*$, гарантирующему вещественность собственных значений энергии (проверка такого равенства сводится к интегрированию по частям выражения $\psi_n^* \hat{H} \psi_{n'}$; звездочка означает комплексное сопряжение). С этой точки зрения уравнение (1.29) предпочтительнее, чем (1.28). Для того чтобы получить граничные условия при $z = 0$, проинтегрируем уравнение (1.29) в окрестности значения $z = 0$ малого размера 2ε ; получим:

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{m} \frac{d\psi}{dz} \Big|_{z=-\varepsilon}^{z=\varepsilon} = \int_{-\varepsilon}^{\varepsilon} dz \left(E - U - \frac{\hbar^2 K^2}{2m} \right) \psi.$$

Предполагается, что подинтегральное выражение в этом равенстве имеет конечную величину, поэтому при $\varepsilon \rightarrow 0$ интеграл обращается в нуль, и, следовательно,

$$\frac{1}{m} \frac{d\psi}{dz} \Big|_{z=\varepsilon} - \frac{1}{m} \frac{d\psi}{dz} \Big|_{z=-\varepsilon} = 0, \quad \varepsilon \rightarrow 0.$$

Полученное условие означает, что вследствие скачка эффективной массы на границе материалов А и В производная функции ψ также испытывает скачок, но величина $(1/m)(d\psi/dz)$ остается непрерывной:

$$\frac{1}{m} \frac{d\psi}{dz} \Big|_A = \frac{1}{m} \frac{d\psi}{dz} \Big|_B. \quad (1.31)$$

Конечный скачок производной функции ψ возможен лишь при условии, что сама функция ψ непрерывна на границе между материалами А и В:

$$\psi|_A = \psi|_B. \quad (1.32)$$

Кроме того, к волновой функции следует предъявить естественное с физической точки зрения требование *ограниченности*, которым будут исключаться решения $\psi(z)$, неограниченно возрастающие при $z \rightarrow \pm\infty$.

Введем обозначение W для разрыва краев зоны проводимости:

$$W = E_{c,B} - E_{c,A} > 0. \quad (1.33)$$

Эта разность энергий задает высоту потенциальных барьеров слева и справа от ямы, то есть – глубину квантовой ямы. Начало отсчета энергии электрона выберем на уровне дна квантовой ямы $E_{c,A}$, так что $E_{c,A} = 0$.

Тогда в области барьеров уравнение Шредингера (1.28) примет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_B} \frac{d^2\psi}{dz^2} = \left(E - W - \frac{\hbar^2 K^2}{2m_B} \right) \psi, \quad z < 0 \quad \text{и} \quad z > d. \quad (1.34)$$

Характер решений $\psi(z)$ определяется знаком величины, стоящей в скобках в правой стороне уравнения (1.34). Если указанная величина положительна, то мы обозначим ее как $\hbar^2 k_{z,B}^2 / (2m_B)$:

$$\frac{\hbar^2 k_{z,B}^2}{2m_B} = \left(E - W - \frac{\hbar^2 K^2}{2m_B} \right) > 0. \quad (1.35)$$

Тогда общее решение $\psi(z)$ уравнения (1.34) будет иметь вид линейной комбинации плоских волн (1.11) с положительным значением z -составляющей волнового вектора $k_z = k_{z,B}$. В слое А, то есть в области потенциальной ямы, решение сохраняет осциллирующий характер (1.11). Четыре граничных условия (по два уравнения (1.31)–(1.32) для каждой из двух границ между слоями В/А/В) вместе с условием нормировки оставляют свободным один из шести коэффициентов в трех функциях типа (1.11) и не ведут к квантованию величины $k_{z,B}$. В этом случае энергетический спектр электрона непрерывен:

$$E(\mathbf{k}) = W + \frac{\hbar^2 K^2}{2m_B} + \frac{\hbar^2 k_{z,B}^2}{2m_B} = W + \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m_B}, \quad (1.36)$$

где \mathbf{k} – трехмерный волновой вектор с непрерывными действительными компонентами $k_x, k_y, k_{z,B}$. Таким образом, неравенству (1.35) отвечает картина надбарьерного движения электрона с произвольной величиной кинетической энергии $\hbar^2 \mathbf{k}^2 / (2m_B)$ в зоне проводимости материала В. Другими словами, если энергия электрона E превышает высоту барьеров W , то имеется континуум состояний, в которых электрон не удерживается ямой, а движется по всему объему образца, испытывая с некоторой вероятностью зеркальное отражение от слоя А. Более подробно надбарьерное движение мы рассмотрим в разделе 1.5.

С уменьшением энергии E знак неравенства (1.35) изменяется на противоположный, и z -компонента волнового вектора в области барьеров становится мнимой: $k_{z,B} = i\gamma_B$; положительная величина γ_B определяется формулой

$$-\frac{\hbar^2 \gamma_B^2}{2m_B} = \left(E - W - \frac{\hbar^2 K^2}{2m_B} \right) < 0. \quad (1.37)$$

В этом случае общее решение уравнения (1.34) будет иметь вид линейной комбинации функций $\exp(\pm\gamma_B z)$, обладающих монотонным поведением:

$$\psi(z) = A \exp(-\gamma_B z) + B \exp(\gamma_B z). \quad (1.38)$$

При $z \rightarrow -\infty$ функция $\exp(-\gamma_B z)$ неограниченно возрастает, поэтому в силу требования ограниченности волновой функции (1.38) следует в области $z < 0$ коэффициент A приравнять нулю. Подобным же образом для $z > d$ следует в (1.38) положить равным нулю коэффициент B .

В области потенциальной ямы уравнение Шредингера (1.28) принимает вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_A} \frac{d^2\psi}{dz^2} = \left(E - \frac{\hbar^2 K^2}{2m_A} \right) \psi, \quad 0 < z < d. \quad (1.39)$$

Введем по аналогии с (1.35) величину $k_{z,A}$:

$$\frac{\hbar^2 k_{z,A}^2}{2m_A} = \left(E - \frac{\hbar^2 K^2}{2m_A} \right) > 0. \quad (1.40)$$

Тогда общее решение уравнения (1.39) запишется в форме осциллирующей функции (1.11) с положительным значением волнового вектора $k_z = k_{z,A}$.

Собрав все вместе, мы найдем, что при соблюдении неравенств (1.37) и (1.40) волновая функция, удовлетворяющая требованию ограниченности, имеет вид:

$$\psi(z) = \begin{cases} B_1 \exp(\gamma_B z), & z < 0, \\ A_2 \exp(ik_{z,A}z) + B_2 \exp(-ik_{z,A}z), & 0 < z < d, \\ A_3 \exp[-\gamma_B(z-d)], & z > d. \end{cases} \quad (1.41)$$

Вспоминая, что в квантовой механике величина $|\psi(z)|^2$ есть плотность вероятности обнаружения электрона в окрестности точки z , заключаем, что

функция (1.41) описывает состояние электрона, локализованное в квантовой яме А. Действительно, в глубь слоев В, окружающих слой А, вероятность обнаружения электрона экспоненциально убывает. Оценкой для глубины проникновения волновой функции из квантовой ямы в область барьера служит величина $1/\gamma_B$. Связывание электрона квантовой ямой иногда называют конфинментом.

Четыре граничных условия (1.31)–(1.32) при $z = 0$ и $z = d$ составляют систему однородных уравнений для четырех неизвестных B_1, A_2, B_2, A_3 :

$$\left\{ \begin{array}{l} B_1 = A_2 + B_2 \\ \frac{\gamma_B}{m_B} B_1 = \frac{ik_{z,A}}{m_A} (A_2 - B_2) \\ A_2 \exp(ik_{z,A}d) + B_2 \exp(-ik_{z,A}d) = A_3 \\ \frac{ik_{z,A}}{m_A} (A_2 \exp(ik_{z,A}d) - B_2 \exp(-ik_{z,A}d)) = \frac{-\gamma_B}{m_B} A_3 \end{array} \right. \quad (1.42)$$

Для того чтобы система однородных линейных уравнений имела отличное от нуля решение, определитель системы следует приравнять нулю. В задаче (1.42) определитель зависит от переменных E и K , входящих в $k_{z,A}$ и γ_B . Следовательно, при любом заданном значении K равенство определителя нулю имеет смысл уравнения для энергии E . Это уравнение называется *дисперсионным уравнением* (ДУ), так как его корни $E_n(K)$ дают закон дисперсии в подзонах размерного квантования – зависимость энергии от двумерного волнового вектора, соответствующего движению электрона в плоскости квантовой ямы. Отметим, что в примере раздела 1.2.1 в роли ДУ выступало уравнение (1.15), являющееся условием равенства нулю определителя системы (1.13). Вывод и решение ДУ – основной шаг в теоретическом расчете энергетических спектров различных полупроводниковых структур.

Коэффициенты системы (1.42) составляют матрицу размером 4×4 . В данном примере можно упростить вычисление определителя, понизив размер матрицы: из первой пары уравнений в системе (1.42) легко исключить неизвестную B_1 , а из второй пары – неизвестную A_3 . Если ввести обозначение

$$\beta = \frac{k_{z,A} m_B}{\gamma_B m_A}, \quad (1.43)$$

то система уравнений для оставшихся двух неизвестных A_2, B_2 примет вид:

$$\begin{cases} (1 - i\beta)A_2 + (1 + i\beta)B_2 = 0 \\ (1 + i\beta)\exp(ik_{z,A}d)A_2 + (1 - i\beta)\exp(-ik_{z,A}d)B_2 = 0 \end{cases} \quad (1.44)$$

Приравняв нулю определитель, составленный из коэффициентов системы (1.44), получим дисперсионное уравнение:

$$(1 - i\beta)^2 \exp(-ik_{z,A}d) - (1 + i\beta)^2 \exp(ik_{z,A}d) = 0. \quad (1.45)$$

Тождества тригонометрии позволяют представить это ДУ в различных формах, например,

$$\left(\frac{1}{\beta} - \beta\right) \sin(k_{z,A}d) + 2 \cos(k_{z,A}d) = 0, \quad (1.46)$$

или

$$\left(\operatorname{tg} \frac{k_{z,A}d}{2} - \frac{1}{\beta}\right) \left(\operatorname{tg} \frac{k_{z,A}d}{2} + \beta\right) = 0. \quad (1.47)$$

Функция β , определенная соотношением (1.43), содержит величины

$$k_{z,A} = \sqrt{\frac{2m_A}{\hbar^2} E - K^2}, \quad (1.48)$$

$$\gamma_B = \sqrt{\frac{2m_B}{\hbar^2} (W - E) + K^2}. \quad (1.49)$$

Таким образом, ДУ представляет собой трансцендентное уравнение для $E(K)$, решения которого должны быть найдены численным методом.

Качественные черты волновой функции (1.41) можно определить, не решая ДУ. С этой целью заметим, что из ДУ в форме (1.45) следует соотношение

$$\frac{1 - i\beta}{1 + i\beta} = \pm \exp(ik_{z,A}d), \quad (1.50)$$

причем, согласно первому уравнению в системе (1.44), выражение в левой стороне (1.50) есть $-B_2/A_2$. Взяв в правой стороне (1.50) знак минус, получим $B_2 = \exp(ik_{z,A}d) A_2$. Выбирая постоянную A_2 в виде $A_2 = (C/2)\exp(-ik_{z,A}d/2)$ и учитывая первые уравнения в каждой из двух пар (1.42), которые обеспечивают непрерывность волновой функции, найдем, что $B_1 = A_3 = C \cos(k_{z,A}d/2)$. В результате, волновая функция (1.41) запишется в виде:

$$\psi(z) = C \begin{cases} \cos(k_{z,A}d/2) \exp(\gamma_B z), & z < 0, \\ \cos[k_{z,A}(z - d/2)], & 0 < z < d, \\ \cos(k_{z,A}d/2) \exp[-\gamma_B(z - d)], & z > d, \end{cases} \quad (1.51)$$

где C – нормировочная постоянная. Мы видим, что решение (1.51) представляет собой четную функцию координаты $z - d/2$. Граничные условия (1.31) для производной этой функции сводятся к уравнению

$$\operatorname{tg}(k_{z,A}d/2) - 1/\beta = 0, \quad (1.52)$$

которое содержится в (1.47), как один из двух возможных случаев. Уравнение (1.52) определяет подзоны размерного квантования $E_n(K)$ для четных состояний. Аналогичным образом, взяв в правой стороне (1.50) знак плюс и полагая $A_2 = (C/2i)\exp(-ik_{z,A}d/2)$, получим нечетное решение:

$$\psi(z) = C \begin{cases} -\sin(k_{z,A}d/2) \exp(\gamma_B z), & z < 0, \\ \sin[k_{z,A}(z - d/2)], & 0 < z < d, \\ \sin(k_{z,A}d/2) \exp[-\gamma_B(z - d)], & z > d. \end{cases} \quad (1.53)$$

Граничные условия (1.31) для производной функции (1.53) сводятся к уравнению

$$\operatorname{tg}(k_{z,A}d/2) + \beta = 0, \quad (1.54)$$

определяющему размерно-квантованные подзоны $E_n(K)$ для нечетных состояний; это уравнение также содержится в (1.47). Тот факт, что стационарные состояния электрона в симметричной квантовой яме должны обладать определенной четностью по отношению к отражению относительно центра симметрии, конечно, можно было предвидеть заранее.

На рис. 1.3, *а* показана диаграмма различных областей на плоскости с координатами E, K . Рис. 1.3, *б* иллюстрирует графический способ решения уравнения (1.47) при $K = 0$. Значения параметров квантовой ямы в этом примере приблизительно соответствуют параметрам зоны проводимости полупроводниковых соединений GaAs (материал А) и $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ при $x = 0,3$ (материал В): $m_A = 0,067 m_0$, $m_B = 0,092 m_0$, $W = 0,224$ эВ.

Легко заметить, что четные и нечетные решения последовательно чередуются, причем решение с наименьшей энергией – четное, не имеющее узлов. Видно также, что график функции

$$\frac{1}{\beta(k_{z,A} d)} \Big|_{K=0} = \sqrt{\frac{m_A}{m_B}} \frac{\sqrt{(2m_A W d^2 / \hbar^2) - (k_{z,A} d)^2}}{k_{z,A} d} \quad (1.55)$$

при любом значении безразмерного параметра $2m_A W d^2 / \hbar^2$ имеет по меньшей мере одну точку пересечения с графиком $\text{tg}(k_{z,A} d / 2)$. Следовательно, даже в очень узкой или мелкой ($2m_A W d^2 / \hbar^2 \ll 1$) симметричной яме *один энергетический уровень обязательно существует*. Нижней точке графика функции (1.55) соответствует значение $1/\beta = 0$, в такой точке $E = W$. С ростом толщины ямы d (или глубины ямы W) эта точка движется направо, и каждый раз, как только отвечающее ей значение $k_{z,A} d$ становится больше $n\pi$ с целым числом n , в яме появляется новый, $(n+1)$ -й уровень; в момент появления уровня его энергия совпадает с W . Таким образом, количество уровней в симметричной яме равно величине

$$\text{Int} \left(\frac{1}{\pi} (k_{z,A} d) \Big|_{E=W}^{K=0} \right) + 1 = \text{Int} \left(\frac{1}{\pi} \sqrt{2m_A W d^2 / \hbar^2} \right) + 1,$$

где символом $\text{Int}(x)$ обозначена целая часть числа x .

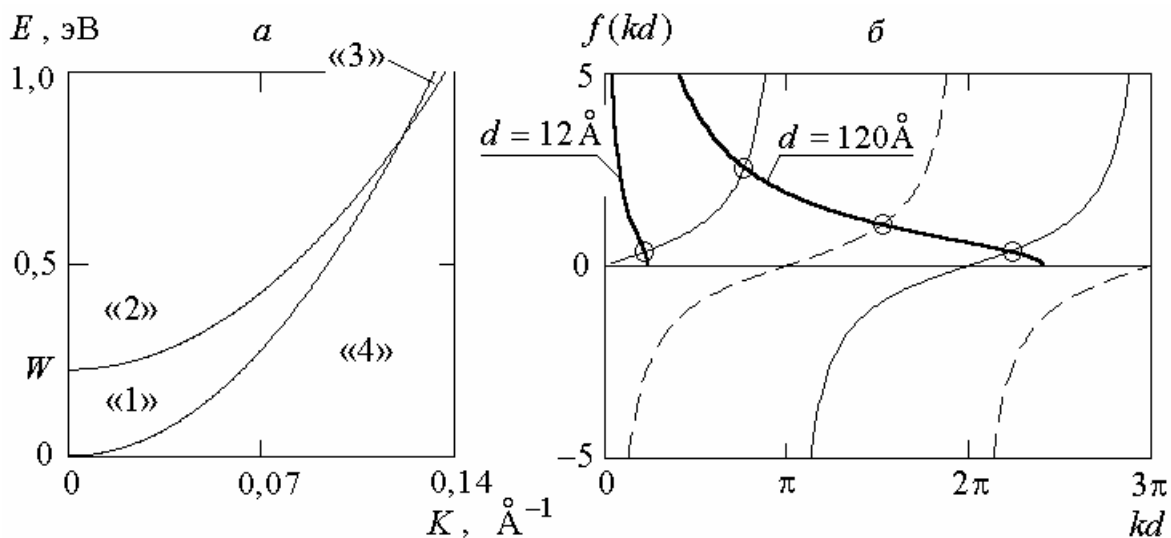


Рис. 1.3. К решению уравнения (1.47).

a – параболы $E(K) = W + \hbar^2 K^2 / (2m_B)$ и $E(K) = \hbar^2 K^2 / (2m_A)$, разграничивающие характерные области на (E, K) -плоскости. В области «1» волновой вектор $k_{z,A}$ имеет действительные значения, $k_{z,B}$ – мнимые. Здесь располагаются решения дисперсионного уравнения – подзоны размерного квантования $E_n(K)$; волновая функция электрона осциллирует в слое материала А (квантовая яма) и убывает в глубь слоев материала В (барьеры). «2» – область непрерывного спектра энергии с действительными $k_{z,A}$ и $k_{z,B}$; волновая функция $\psi(z)$ имеет осциллирующий характер как в слое А, так и в слоях В. «3» – область непрерывного спектра энергии с мнимым $k_{z,A}$ и действительным $k_{z,B}$; при отражении электрона от квантовой ямы его волновая функция убывает в глубь слоя А, но осциллирует в слоях В. «4» – $k_{z,A}$ и $k_{z,B}$ мнимые, здесь нет разрешенных состояний. b – графики следующих функций $f(kd)$: $\text{tg}(kd/2)$ – тонкие линии, $-\text{ctg}(kd)$ – штриховые линии, $1/\beta$ – жирные линии (для двух значений толщины квантовой ямы d). Величина β представляет собой выражение (1.43), записанное в форме функции безразмерной переменной kd , где $k \equiv k_{z,A}$. Представлен случай с $K = 0$. Решения с четной волновой функцией $\psi(z)$ соответствуют уравнению (1.52) и поэтому определяются точками пересечения жирной линии с тонкими линиями (точки пересечения выделены кружками). Нечетные решения отвечают уравнению (1.54) и определяются точками пересечения жирной линии с пунктирными линиями. Формула (1.40) с $K = 0$ позволяет по найденным в точках пересечения значениям k_n вычислить уровни энергии размерного квантования E_n .

В примере, приведенном на рис. 1.3, б, квантовая яма глубиной $W = 0,224$ эВ и толщиной $d = 12 \text{ \AA}$ содержит только один уровень – с энергией $E_1 = 0,19$ эВ. При толщине $d = 120 \text{ \AA}$ в яме образуются три уровня энергии: $E_1 = 0,023$ эВ, $E_2 = 0,089$ эВ, $E_3 = 0,192$ эВ. Эти уровни энергии и принадлежащие им волновые функции, рассчитанные по формулам (1.51), (1.53), изображены на рис. 1.4. Отметим, что в случае достаточно широкой ямы, содержащей большое количество уровней, для нижних уровней приблизительно выполняются соотношения пропорциональности $E_n \propto n^2$ и $E_n \propto d^{-2}$, характерные для ямы с бесконечно высокими стенками; такие соотношения обусловлены тем, что вне ямы волновая функция быстро убывает. Для верхних уровней эти соотношения не выполняются. В частности, в узкой яме, содержащей единственный уровень, энергия уровня с уменьшением толщины ямы d стремится к конечному значению W , а глубина проникновения волновой функции под барьеры, окружающие яму, намного превышает толщину ямы.

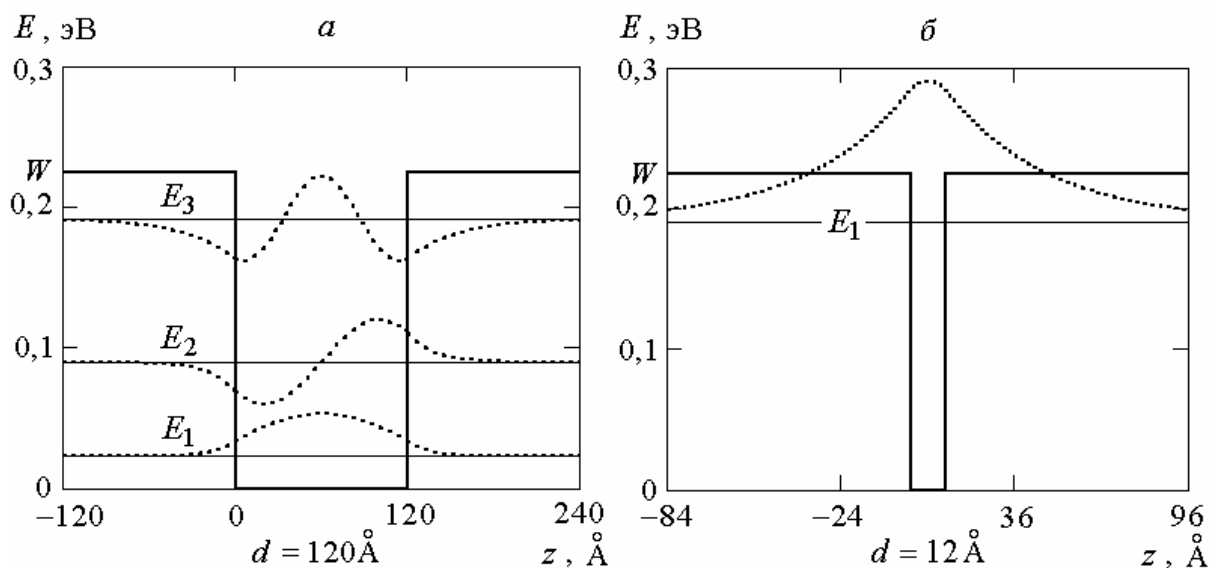


Рис. 1.4. Электронные состояния в квантовой яме конечной глубины. *a* – горизонтальными прямыми показаны три размерно-квантованных уровня энергии в квантовой яме шириной $d = 120 \text{ \AA}$; пунктиром изображены принадлежащие им волновые функции. В расчете были выбраны значения параметров, свойственные зоне проводимости соединений GaAs (материал А) и $\text{Ga}_{1-x}\text{Al}_x\text{As}$ при $x = 0,3$ (материал В): $m_A = 0,067 m_0$, $m_B = 0,092 m_0$, $W = 0,224$ эВ.

С уменьшением ширины ямы количество уровней в ней уменьшается. *б* – при ширине $d = 120 \text{ \AA}$ в яме присутствует только один уровень; пунктирная кривая – график волновой функции для этого уровня. Энергия уровня E_1 в узкой яме мало отличается от высоты потенциальных стенок W , а волновая функция имеет «хвосты», простирающиеся глубоко в область потенциальных барьеров.

На рис. 1.5, *а* изображены дисперсионные кривые $E_n(K)$, $n = 1, 2, 3$, для трех подзон, которые соответствуют уровням размерного квантования, показанным на рис. 1.4, *а*. Вторая часть рисунка 1.5 иллюстрирует зависимость волновой функции нижней подзоны от двумерного волнового вектора K . Аналогичная зависимость от K характерна и для волновых функций остальных подзон.

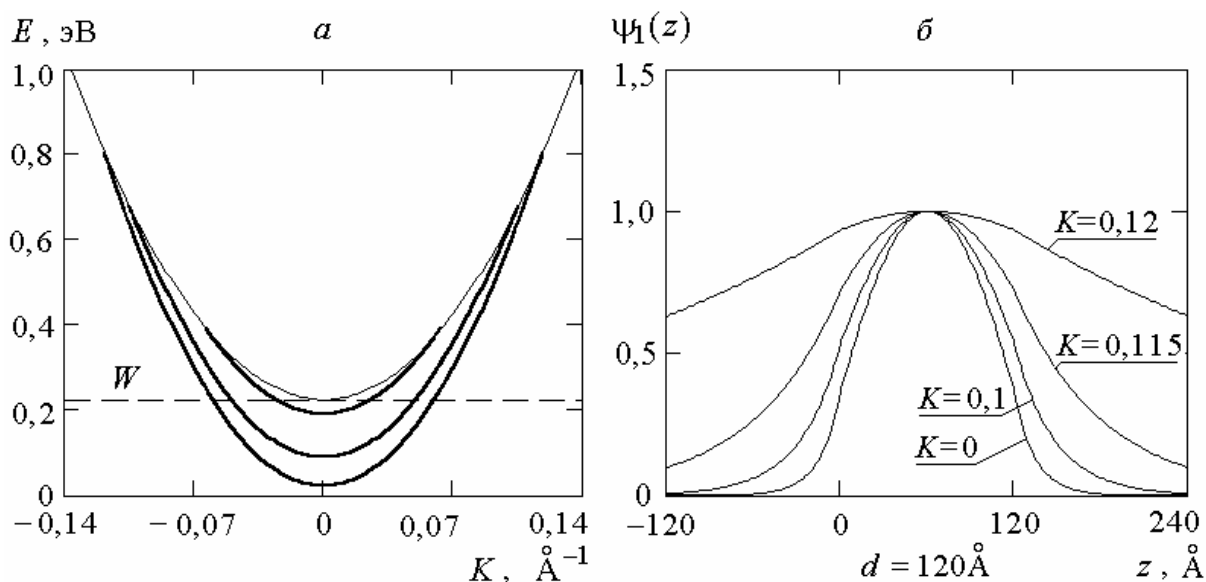


Рис. 1.5. Зависимость электронных состояний от импульса $\hbar K$ в плоскости квантовой ямы.

а – жирными линиями показаны подзоны $E_1(K)$, $E_2(K)$, $E_3(K)$ в модели квантовой ямы с параметрами $m_A = 0,067 m_0$, $m_B = 0,092 m_0$, $W = 0,224$ эВ. Толщина ямы $d = 120 \text{ \AA}$. K – величина двумерного волнового вектора, параллельного плоскости ямы. Тонкой линией показана граница (парабола $W + \hbar^2 K^2 / (2m_B)$), которая отделяет размерно-квантованные состояния от трехмерных состояний с непрерывным спектром энергии. *б* – графики волновой функции в подзоне $E_1(K)$ для нескольких значений K (в единицах \AA^{-1}).

В силу неравенства $m_B > m_A$ кривые $E_n(K)$ оканчиваются на границе с непрерывным спектром, а не уходят в «бесконечность», как было бы в

модели с $m_B = m_A$. Другим следствием различия эффективной массы электрона в слоях А и В является малозаметная непараболичность подзон $E_n(K)$, возникающая несмотря на то, что в данной модели зона проводимости в каждом из объемных материалов А и В параболична. На качественном уровне это легко пояснить следующим образом. Как показывает рис. 1.5, б, с ростом волнового вектора K волновая функция все глубже проникает в область барьеров, и, следовательно, увеличивается время пребывания локализованного электрона вне ямы. Поэтому эффективное значение массы электрона зависит от K и оказывается промежуточным между m_B и m_A . Вблизи дна каждой подзоны приближенно выполняется параболический закон дисперсии

$$E_n(K) = E_n(0) + \hbar^2 K^2 / (2m_{n\parallel}) \quad (1.56)$$

со значениями «параллельной» эффективной массы $m_{n\parallel}$ в интервале от m_A до m_B . С уменьшением толщины ямы, по мере вытеснения волновой функции в область барьеров, параллельная эффективная масса электрона увеличивается, см. рис. 1.6.

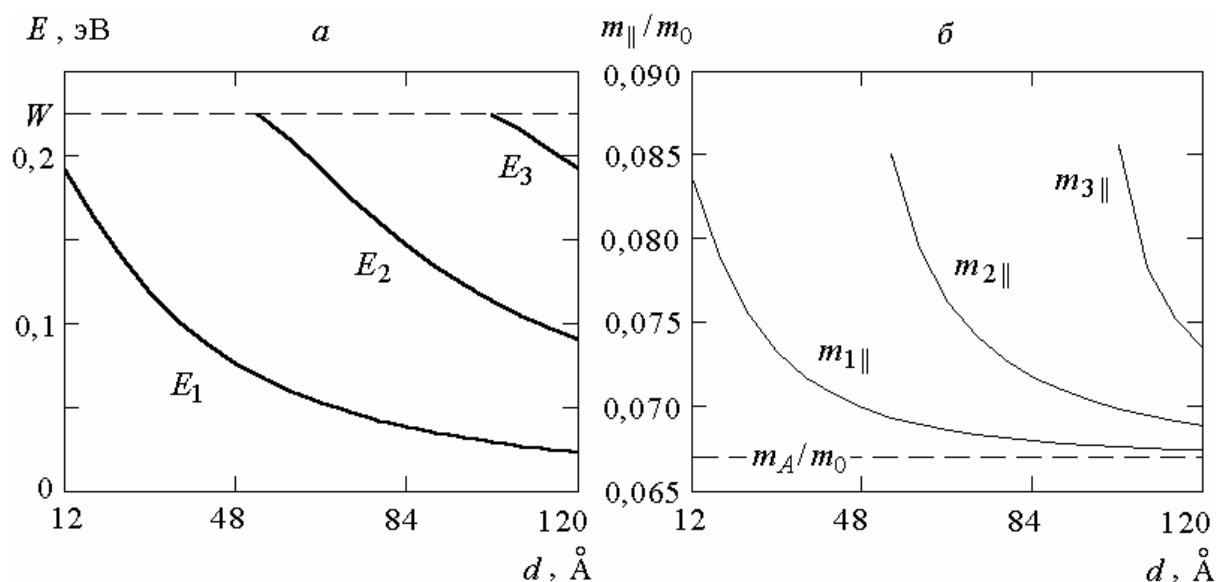


Рис. 1.6. Зависимость размерно-квантованного энергетического спектра электрона от толщины квантовой ямы.

a – зависимость электронных уровней энергии размерного квантования от толщины квантовой ямы; *б* – зависимость параллельной эффективной массы (в единицах m_0) на дне подзон размерного квантования от толщины ямы. Эти

данные получены на основе численного решения дисперсионного уравнения (1.46) с параметрами $m_A = 0,067m_0$, $m_B = 0,092m_0$, $W = 0,224$ эВ. Аналогичные вычисления показывают, что с ростом отношения m_B / m_A уровни размерного квантования смещаются вниз, в область меньших значений энергии.

1.2.3. Несимметричная яма с прямоугольным рельефом

Нередко в гетероструктурах два слоя широкозонного материала (В1 и В2), окружающие слой узкозонного материала А малой толщины d , имеют различный состав. В этом случае разрывы краев зоны проводимости на левой и правой границах слоя А не совпадают, и кроме того, значения эффективной массы электрона различаются во всех трех слоях:

$$U(z) = \begin{cases} E_{c,A} & \text{при } 0 \leq z \leq d, \\ E_{c,B1} & \text{при } z < 0, \\ E_{c,B2} & \text{при } z > d, \end{cases} \quad m(z) = \begin{cases} m_A & \text{при } 0 \leq z \leq d, \\ m_{B1} & \text{при } z < 0, \\ m_{B2} & \text{при } z > d. \end{cases} \quad (1.57)$$

В результате, квантовая яма оказывается несимметричной; энергетические высоты ее левого и правого барьеров составляют

$$W_1 = E_{c,B1} - E_{c,A}, \quad W_2 = E_{c,B2} - E_{c,A}. \quad (1.58)$$

Мы будем считать для определенности, что в рассматриваемой модели $W_1 < W_2$, $m_A < m_{B1} < m_{B2}$. Уровень дна квантовой ямы выбирается в качестве начала отсчета энергии: $E_{c,A} = 0$.

Если энергия электрона E превышает величину барьера W_1 , то движение электрона в общем случае носит трехмерный характер с непрерывным спектром квантовых чисел. При $W_1 < E < W_2$ такое движение реализуется, в основном, в областях В1 и А, поскольку в глубь области В2 волновая функция электрона убывает. При $E > W_2$ электрон движется по всему объему образца, испытывая с некоторой вероятностью зеркальное отражение от слоя А.

Для исследования размерно-квантованных состояний, возникающих из-за наличия квантовой ямы в слое А, в первую очередь следует

рассмотреть интервал энергии $0 < E < W_1$. Действуя по аналогии с предыдущим примером, мы приходим к уравнению Шредингера (1.28) и к граничным условиям вида:

$$\psi|_{B1} = \psi|_A, \quad \left. \frac{1}{m} \frac{d\psi}{dz} \right|_{B1} = \left. \frac{1}{m} \frac{d\psi}{dz} \right|_A \quad \text{при } z = 0, \quad (1.59)$$

$$\psi|_A = \psi|_{B2}, \quad \left. \frac{1}{m} \frac{d\psi}{dz} \right|_A = \left. \frac{1}{m} \frac{d\psi}{dz} \right|_{B2} \quad \text{при } z = d. \quad (1.60)$$

Решение $\psi(z)$ уравнения (1.28) с учетом условия ограниченности волновой функции $\psi(z)$ ищем в форме

$$\psi(z) = \begin{cases} B_1 \exp(\gamma_{B1}z), & z < 0, \\ A_2 \exp(ik_{z,A}z) + B_2 \exp(-ik_{z,A}z), & 0 < z < d, \\ A_3 \exp[-\gamma_{B2}(z-d)], & z > d, \end{cases} \quad (1.61)$$

где $k_{z,A}$ определяется выражением (1.48), а γ_{B1} и γ_{B2} даются формулой (1.49) с заменой m_B, W на m_{B1}, W_1 и m_{B2}, W_2 соответственно.

Введем функции β_1, β_2 , зависящие от энергии электрона E и от величины волнового вектора K , параллельного плоскости квантовой ямы:

$$\beta_1 = \frac{k_{z,A} m_{B1}}{\gamma_{B1} m_A}, \quad \beta_2 = \frac{k_{z,A} m_{B2}}{\gamma_{B2} m_A}. \quad (1.62)$$

Тогда граничные условия (1.59)–(1.60) примут вид следующей системы четырех однородных уравнений для неизвестных B_1, A_2, B_2, A_3 :

$$\begin{cases} B_1 = A_2 + B_2 \\ B_1 = i\beta_1 (A_2 - B_2) \\ A_2 \exp(ik_{z,A}d) + B_2 \exp(-ik_{z,A}d) = A_3 \\ -i\beta_2 (A_2 \exp(ik_{z,A}d) - B_2 \exp(-ik_{z,A}d)) = A_3 \end{cases} \quad (1.63)$$

После исключения неизвестных B_1 и A_3 остается система двух уравнений для A_2, B_2 :

$$\begin{cases} (1 - i\beta_1)A_2 + (1 + i\beta_1)B_2 = 0 \\ (1 + i\beta_2)\exp(ik_{z,A}d)A_2 + (1 - i\beta_2)\exp(-ik_{z,A}d)B_2 = 0 \end{cases} \quad (1.64)$$

Приравняв к нулю определитель системы (1.64), получаем дисперсионное уравнение, которое в результате простых преобразований с применением тождеств тригонометрии может быть представлено в форме:

$$(1 - \beta_1\beta_2) \sin(k_{z,A}d) + (\beta_1 + \beta_2) \cos(k_{z,A}d) = 0, \quad (1.65)$$

или

$$\operatorname{tg} \frac{k_{z,A}d}{2} - \operatorname{ctg} \frac{k_{z,A}d}{2} = \frac{2(1 - \beta_1\beta_2)}{\beta_1 + \beta_2}. \quad (1.66)$$

Для того чтобы выяснить качественные черты волновой функции (1.61), заметим, что из первого уравнения системы (1.64) следует соотношение

$$\frac{B_2}{A_2} = -\frac{1 - i\beta_1}{1 + i\beta_1} = -\exp(-i2\delta), \quad (1.67)$$

где δ – фаза комплексной величины $1 + i\beta_1$:

$$\delta = \operatorname{arctg} \beta_1. \quad (1.68)$$

Если теперь ввести нормировочную постоянную C и положить $A_2 = C \exp(i\delta)/(2i)$, то волновая функция (1.61) запишется в виде

$$\psi(z) = C \begin{cases} \sin \delta \exp(\gamma_{B1}z), & z < 0, \\ \sin(k_{z,A}z + \delta), & 0 < z < d, \\ \sin(k_{z,A}d + \delta) \exp[-\gamma_{B2}(z - d)], & z > d. \end{cases} \quad (1.69)$$

Таким образом, в общих чертах волновая функция (1.69) подобна функциям (1.51) и (1.53) в симметричной яме, однако расположение ее максимумов, определяемое фазовым сдвигом δ , теперь не обязано быть

симметричным относительно центра квантовой ямы. Чтобы получить количественную картину, надо при заданном K решить ДУ (1.65) для переменной E , затем найденный корень $E_n(K)$ подставить в выражения для $k_{z,A}$, γ_{B1} , γ_{B2} , δ и воспользоваться этими числами для определения значений волновой функции $\psi_n(z)$ по формуле (1.69). Решение ДУ (1.66) с помощью графического метода, а также результаты вычисления волновой функции (1.69) иллюстрируются рисунком 1.7.

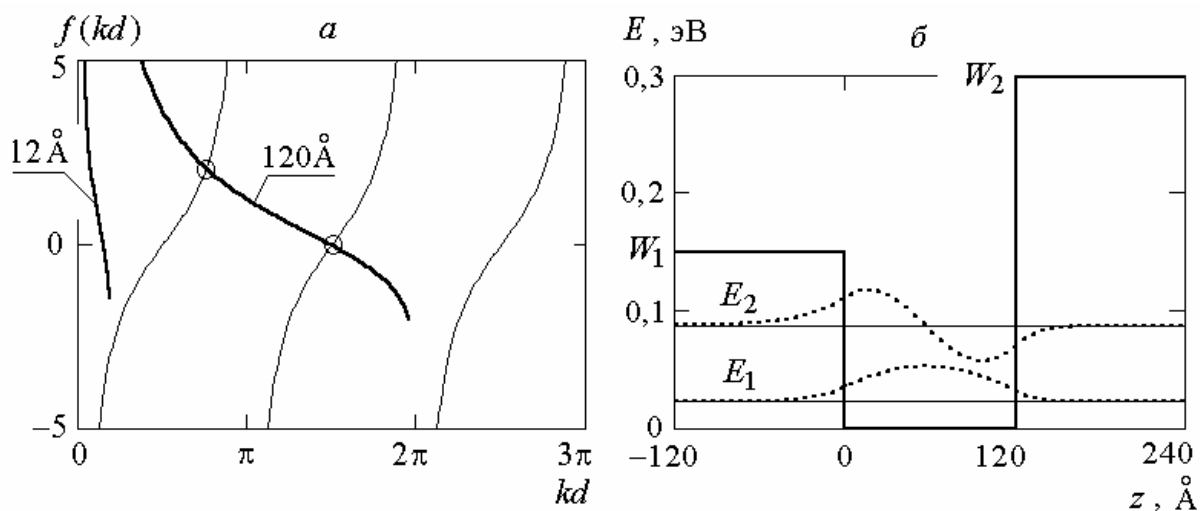


Рис. 1.7. К решению уравнения (1.66).

a – графики для следующих функций $f(kd)$ с $k = k_{z,A}$ и $K = 0$: тонкие линии – для выражения в левой части (1.66), жирные линии – для выражения в правой части (1.66) при двух значениях толщины квантовой ямы d (12 \AA и 120 \AA). Корням дисперсионного уравнения (1.66) отвечают точки пересечения жирной линии с тонкими линиями. В этом примере значения параметров зоны проводимости были выбраны в соответствии с полупроводниками GaAs (слой A с $m_A = 0,067 m_0$), $\text{Ga}_{0,8}\text{Al}_{0,2}\text{As}$ (слой B1 с $m_{B1} = 0,084 m_0$, $W_1 = 0,15 \text{ эВ}$) и $\text{Ga}_{0,6}\text{Al}_{0,4}\text{As}$ (слой B2 с $m_{B2} = 0,1 m_0$, $W_2 = 0,3 \text{ эВ}$). Видно, что при $d = 12 \text{ \AA}$ в квантовой яме нет размерно-квантованных состояний, тогда как при $d = 120 \text{ \AA}$ образуются два уровня размерного квантования. b – найденные уровни энергии E_n показаны горизонтальными прямыми, принадлежащие им волновые функции $\psi_n(z)$ изображены пунктиром.

Таким образом, принципиальное отличие несимметричной квантовой ямы от симметричной заключается в том, что с уменьшением толщины

несимметричной ямы в ней полностью исчезают уровни локализованных состояний; в симметричной яме один уровень обязательно остается.

1.2.4. Квантовая яма с линейно изменяющимся потенциалом

Создавая в квантово-размерной структуре постоянное электрическое поле в направлении, поперечном к плоскости структуры (то есть в направлении оси z), можно эффективно управлять формой потенциального рельефа. Если параллельно оси z действует однородное электрическое поле с напряженностью F , то к потенциальной энергии электрона в прямоугольной яме добавляется слагаемое eFz , где e – заряд электрона. В этом случае стационарные состояния по-прежнему имеют вид произведения $\exp(i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}_{\parallel})\psi(z)$, и волновая функция $\psi(z)$ определяется уравнением Шредингера (1.28) с условиями сшивания (1.31)–(1.32) на гетерограницах, однако теперь вместо экспоненциальных функций $\exp(\pm ikz)$ двумя линейно независимыми решениями в каждом слое между границами являются функции Эйри первого (A_i) и второго (B_i) рода.

Рассмотрим самую простую модель – квантовую яму с бесконечно высокими барьерами. В области ямы, при $0 \leq z \leq d$, уравнение Шредингера (1.28) можно записать в виде

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dz^2} + eFz\psi = E^{(z)}\psi, \quad (1.70)$$

где

$$E^{(z)} = E - \frac{\hbar^2 K^2}{2m}. \quad (1.71)$$

Поскольку вне ямы, в области бесконечно высоких барьеров волновая функция равна нулю, на стенках ямы (при $z = 0$ и $z = d$) справедливы граничные условия, аналогичные условиям в примере из раздела 1.2.1:

$$\psi(z)|_{z=0} = 0, \quad \psi(z)|_{z=d} = 0. \quad (1.72)$$

Перепишем уравнение (1.70) в следующей форме

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} - \frac{2meF}{\hbar^2} \left(z - \frac{E^{(z)}}{eF} \right) \psi = 0. \quad (1.73)$$

Так как слагаемые обязаны иметь одну и ту же размерность, легко заметить, что величина

$$l_0 = \left(\frac{2meF}{\hbar^2} \right)^{-1/3}$$

играет роль масштаба длины (здесь предполагается, что $eF > 0$). Поэтому при каждом значении энергии $E^{(z)}$ вместо координаты z можно ввести безразмерную переменную

$$\xi = \frac{1}{l_0} \left(z - \frac{E^{(z)}}{eF} \right) = \left(\frac{2meF}{\hbar^2} \right)^{1/3} \left(z - \frac{E^{(z)}}{eF} \right), \quad (1.74)$$

и привести уравнение (1.73) к виду

$$\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} - \xi\psi(\xi) = 0. \quad (1.75)$$

Известно, что общее решение этого уравнения представляется в форме линейной комбинации функций Эйри (их графики приведены на рис. 1.8, а):

$$\psi(\xi) = C_1 \text{Ai}(\xi) + C_2 \text{Bi}(\xi). \quad (1.76)$$

Граничные условия (1.72) в применении к решению (1.76) принимают вид системы однородных уравнений для коэффициентов C_1, C_2 :

$$\begin{cases} C_1 \text{Ai}(\xi|_{z=0}) + C_2 \text{Bi}(\xi|_{z=0}) = 0 \\ C_1 \text{Ai}(\xi|_{z=d}) + C_2 \text{Bi}(\xi|_{z=d}) = 0 \end{cases} \quad (1.77)$$

Чтобы система однородных уравнений имела отличное от нуля решение, необходимо ее определитель приравнять нулю:

$$\text{Ai}(\xi|_{z=0})\text{Bi}(\xi|_{z=d}) - \text{Ai}(\xi|_{z=d})\text{Bi}(\xi|_{z=0}) = 0. \quad (1.78)$$

Это условие с учетом (1.74) является уравнением для переменной $E^{(z)}$, связанной с полной энергией электрона E равенством (1.71). Таким образом, корни уравнения (1.78) представляют собой энергетические уровни размерного квантования $E_n(0)$. Закон дисперсии для подзон размерного квантования $E_n(K)$, как и в примере раздела 1.2.1, остается параболическим и определяется исходным значением эффективной массы m электрона в квантовой яме:

$$E_n(K) = E_n(0) + \frac{\hbar^2 K^2}{2m}. \quad (1.79)$$

Любое из двух уравнений системы (1.77) позволяет для каждой подзоны $E_n(K)$ найти отношение C_2/C_1 и тем самым определить волновую функцию (1.76) с произвольным нормировочным множителем. Результаты таких вычислений приведены на рис. 1.8, б.

Если энергия eFd мала по сравнению с масштабом энергетических зазоров между уровнями в бесконечной прямоугольной яме $\Delta E \sim \hbar^2/(md^2)$, то смещение таких уровней под действием электрического поля F можно оценивать по теории возмущений. Условию $eFd \ll \Delta E$ отвечает неравенство $d \ll l_0$, так что по мере увеличения ширины ямы d теория возмущений утрачивает применимость.

В пределе с $d \rightarrow \infty$ мы приходим к модели бесконечно глубокой ямы с «треугольным» рельефом потенциала U ,

$$U(z) = \begin{cases} eFz, & z > 0, \\ \infty, & z < 0, \end{cases} \quad (1.80)$$

и с новым вторым граничным условием в (1.72):

$$\psi(z)|_{z=0} = 0, \quad \psi(z)|_{z \rightarrow \infty} \rightarrow 0. \quad (1.81)$$

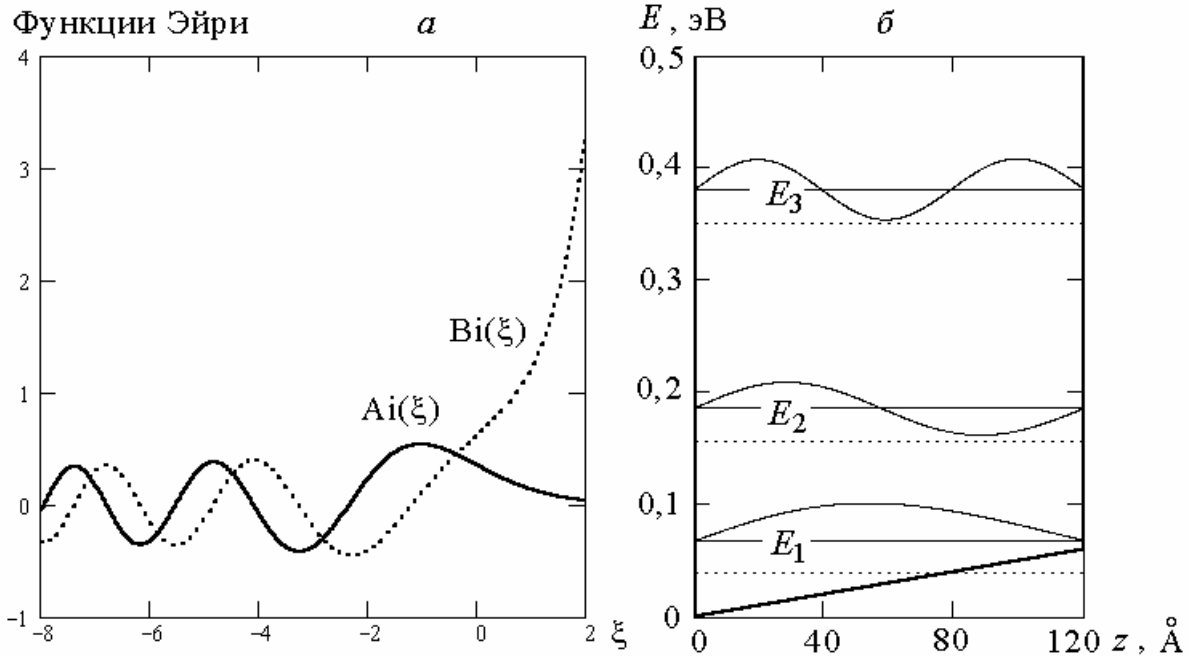


Рис. 1.8. К определению электронных состояний в линейном потенциале. *a* – графики функций Эйри. *б* – три нижних уровня энергии $E_n(0)$ (сплошные горизонтальные прямые) и принадлежащие им волновые функции (кривые линии) в бесконечно глубокой потенциальной яме с потенциалом eFz . Расчет выполнен для ямы шириной $d = 120 \text{ \AA}$ с эффективной массой электрона $m = 0,067 m_0$ при значении напряженности электрического поля $F = 50 \text{ кВ/см}$. Пунктиром показаны уровни энергии при $F = 0$, то есть уровни в прямоугольной бесконечно глубокой яме. Изменение энергетического спектра квантовой системы под действием приложенного извне электрического поля называют эффектом Штарка.

Общее решение уравнения Шредингера с потенциалом (1.80) при $z > 0$ по-прежнему имеет вид линейной комбинации функций Эйри (1.76). Однако теперь коэффициент C_2 в (1.76) необходимо положить равным нулю, так как функция $Bi(\xi)$ неограниченно возрастает при $\xi \rightarrow \infty$; коэффициент C_1 приобретает смысл нормировочной постоянной C . Следовательно, стационарные состояния электрона в треугольном потенциале описываются волновыми функциями вида

$$\psi(\xi) = C \operatorname{Ai}(\xi) = C \operatorname{Ai}\left(\left(\frac{2meF}{\hbar^2}\right)^{1/3}\left(z - \frac{E^{(z)}}{eF}\right)\right) \quad (1.82)$$

с собственными значениями энергии $E^{(z)}$, определяемыми уравнением $\psi(\xi)|_{z=0} = 0$, то есть

$$\operatorname{Ai}\left(-\left(\frac{2meF}{\hbar^2}\right)^{1/3}\frac{E^{(z)}}{eF}\right) = 0. \quad (1.83)$$

Решения трансцендентного уравнения (1.83) можно записать в форме

$$E_n^{(z)} = \left(\frac{(\hbar eF)^2}{2m}\right)^{1/3} (-\xi_n), \quad (1.84)$$

где ξ_n – нули функции $\operatorname{Ai}(\xi)$, то есть корни уравнения $\operatorname{Ai}(\xi) = 0$. Отметим, что первые пять корней есть $\xi_1 = -2,338$, $\xi_2 = -4,087$, $\xi_3 = -5,52$, $\xi_4 = -6,787$, $\xi_5 = -7,944$; при больших n приблизительно выдерживается соотношение $-\xi_n \sim n^{2/3}$. Таким образом, в треугольной яме, в отличие от случая прямоугольной ямы, энергетические уровни с ростом номера n сгущаются: $E_n \propto n^{2/3}$. Закон дисперсии в подзонах размерного квантования дается формулой (1.79).

В бесконечно глубоких потенциальных ямах поведение E_n как функции номера n при больших n легко объясняется следующими соображениями [9]. Обозначим через $l(E)$ ширину ямы на уровне энергии E . Тогда условие квантования энергии, записанное с точностью до безразмерных числовых сомножителей, примет вид равенства, означающего, что на длине $l(E)$ укладывается порядка n длин волн $\lambda(E) \sim \hbar / \sqrt{mE}$:

$$n \hbar / \sqrt{mE} \sim l(E). \quad (1.85)$$

В случае прямоугольной ямы ширина постоянна, $l(E) = d$, и из (1.85) следует известное соотношение $E_n \sim n^2 \hbar^2 / (md^2)$; оно показывает, что с

ростом n интервалы между соседними уровнями энергии увеличиваются. Для параболической ямы, в задаче о линейном осцилляторе с потенциалом $U(z) = m\omega^2 z^2 / 2$, мы имеем $m\omega^2 l^2(E) \sim E$, и условие (1.85) ведет к картине эквидистантных уровней $E_n \sim n\hbar\omega$, также хорошо известной из курса квантовой механики. Наконец, в случае треугольного потенциала (1.80) $eFl(E) = E$, поэтому условие (1.85) приводит к картине сгущающихся уровней энергии:

$$E_n \sim n^{2/3} \left(\frac{(\hbar e F)^2}{m} \right)^{1/3}, \quad n \gg 1. \quad (1.86)$$

Результат вычисления первых пяти уровней (1.84) и принадлежащих им волновых функций (1.82) показан на рис. 1.9, *а*, рядом с решением задачи об экспоненциальной яме.

1.2.5. Квантовая яма с экспоненциальным рельефом

Рассмотрим размерно-квантованные состояния электронов в структуре, показанной на рис. 1.1, *б* (МДП-структура с изгибом зон). Чтобы учесть в этом примере конечную высоту барьера в полупроводнике, мы будем моделировать зависимость положения края зоны проводимости полупроводника от координаты z экспоненциальной функцией $-W \exp(-z/l)$, где W – величина изгиба зоны проводимости, l – масштаб длины, характеризующий протяженность изгиба. Если высоту потенциального барьера на границе полупроводника с диэлектриком для простоты считать бесконечной, то потенциал $U(z)$ в уравнении Шредингера (1.28) для такой модели запишется в форме

$$U(z) = \begin{cases} -W \exp(-z/l), & z > 0, \\ \infty, & z < 0. \end{cases} \quad (1.87)$$

В области диэлектрика, при $z < 0$, волновая функция $\psi(z)$ будет равна нулю, а в области полупроводника (при $z > 0$) она определяется уравнением Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dz^2} - W \exp(-z/l) \psi = E^{(z)} \psi, \quad z > 0, \quad (1.88)$$

где

$$E^{(z)} = E - \frac{\hbar^2 K^2}{2m}. \quad (1.89)$$

Для нахождения уровней размерного квантования следует рассматривать интервал энергии $-W < E^{(z)} < 0$, полагая $E^{(z)} = -|E^{(z)}|$. На волновые функции состояний, локализованных вблизи плоскости $z = 0$, налагаются граничные условия

$$\psi(z)|_{z=0} = 0, \quad \psi(z)|_{z \rightarrow \infty} \rightarrow 0. \quad (1.90)$$

Если вместо z ввести переменную $s = \exp(-z/(2l))$, то уравнение Шредингера (1.88) примет вид

$$s^2 \frac{d^2\psi}{ds^2} + s \frac{d\psi}{ds} + \frac{8ml^2 W}{\hbar^2} s^2 \psi - \frac{8ml^2 |E^{(z)}|}{\hbar^2} \psi = 0. \quad (1.91)$$

С масштабом длины l и эффективной массой m связан характерный масштаб энергии $\hbar^2/(ml^2)$. Им можно воспользоваться для определения безразмерной энергетической переменной $v^2(E^{(z)})$:

$$v^2 = 8ml^2 |E^{(z)}| \hbar^{-2}. \quad (1.92)$$

Аналогичным образом определим безразмерный параметр u , характеризующий «мощность» квантовой ямы:

$$u^2 = 8ml^2 W \hbar^{-2}. \quad (1.93)$$

Наконец, введя новую безразмерную координату $\xi = us$, преобразуем уравнение (1.91) к виду, известному как уравнение Бесселя:

$$\xi^2 \frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} + \xi \frac{d\psi(\xi)}{d\xi} + (\xi^2 - v^2) \psi(\xi) = 0. \quad (1.94)$$

Общее решение уравнения (1.94) при произвольном значении ν представляется линейной комбинацией функции Бесселя $J_\nu(\xi)$ и функции Неймана $N_\nu(\xi)$ порядка ν :

$$\psi(\xi) = C_1 J_\nu(\xi) + C_2 N_\nu(\xi).$$

При $\xi \rightarrow 0$ функция Бесселя $J_\nu(\xi)$ ведет себя как ξ^ν , а функция Неймана порядка $\nu > 0$ – как $\xi^{-\nu}$; если $\nu = 0$, то функция Неймана ведет себя подобно $\ln \xi$. Другими словами, значения $J_\nu(0)$ ограничены, тогда как $|N_\nu(0)| \rightarrow \infty$. Поскольку точка $\xi = 0$ соответствует области $z \rightarrow \infty$, а в ней должно выполняться второе из двух граничных условий (1.90), коэффициент C_2 при функции Неймана необходимо положить равным нулю. Таким образом, волновые функции стационарных состояний в экспоненциальной яме имеют вид

$$\psi(z) = C J_\nu(\xi) = C J_{\sqrt{\frac{8ml^2|E^{(z)}|}{\hbar^2}}} \left(\sqrt{\frac{8ml^2W}{\hbar^2}} e^{-\frac{z}{2l}} \right), \quad (1.95)$$

где значения энергии $E^{(z)}$ определяются корнями уравнения для переменной ν , следующего из первого граничного условия в (1.90):

$$J_\nu \left(\sqrt{\frac{8ml^2W}{\hbar^2}} \right) = 0. \quad (1.96)$$

Решения этого трансцендентного уравнения, представляющие собой дискретные уровни энергии $E_n(0)$, можно записать в виде

$$E_n^{(z)} = -\nu_n^2 \frac{\hbar^2}{8ml^2}, \quad (1.97)$$

где ν_n – корни уравнения $J_\nu(u) = 0$ с $u = (8ml^2W / \hbar^2)^{1/2}$.

Появлению первого энергетического уровня отвечает равенство $E_1 = 0$ и, следовательно, уравнение $J_0(u) = 0$. Наименьший положительный корень этого уравнения отличен от нуля: $u_1 = 2,405$. Следовательно, в

экспоненциальной яме малой мощности уровни отсутствуют; для появления первого уровня параметры ямы должны удовлетворять условию

$$8ml^2W\hbar^{-2} > u_1^2. \quad (1.98)$$

С ростом параметра u первый уровень энергии смещается к дну ямы. Когда значение u превысит величину следующего корня уравнения $J_0(u) = 0$ ($u_2 = 5,52$, $u_3 = 8,654$, $u_4 = 11,792$, $u_5 = 14,931$, ...), в яме появляется второй уровень энергии, и так далее. Результаты вычисления энергетических уровней (1.97) и волновых функций (1.95) проиллюстрированы на рис. 1.9, б.

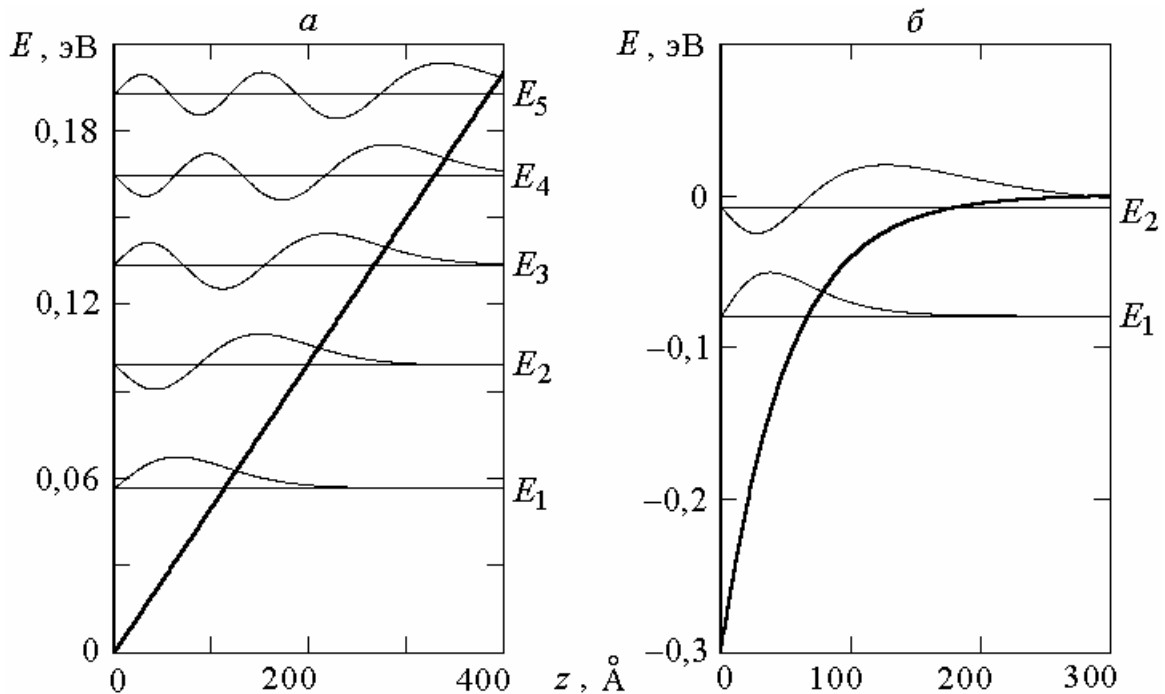


Рис. 1.9. Электронные состояния в квантовых ямах с линейным и экспоненциальным потенциалом.

a – пять нижних уровней энергии $E_n(0)$ (горизонтальные прямые) и принадлежащие им волновые функции (кривые линии) в модели (1.80) с потенциалом eFz при $F = 50$ кВ/см, $m = 0,067 m_0$. *б* – уровни энергии $E_n(0)$ и принадлежащие им волновые функции в экспоненциальной квантовой яме (1.87) глубиной $W = 0,3$ эВ с параметром протяженности $l = 50$ Å; эффективная масса электрона $m = 0,067 m_0$. При указанных значениях параметров в яме образуются только два уровня размерного квантования; безразмерная величина u , определяемая формулой (1.93), составляет 7,26. Закон дисперсии $E_n(K)$ в обеих подзонах размерного квантования имеет вид (1.79).

1.3. ТУННЕЛЬНО-СВЯЗАННЫЕ КВАНТОВЫЕ ЯМЫ

В структурах с двумя (или более) близко расположенными потенциальными ямами волновые функции соседних ям перекрываются друг с другом в области барьера между ямами, так что вероятность обнаружения электрона в области барьера заметно отличается от нуля. Следовательно, электрон может с заметной вероятностью переходить из одной ямы в другую, несмотря на то, что его энергия не превышает величину барьера. Как хорошо известно, это квантовое явление называется туннельным эффектом. Квантовые ямы, в которых вероятность туннельного эффекта не мала, называют туннельно-связанными.

Возникновение туннельной связи по мере сближения ям влияет на положение энергетических уровней в них и на вид волновых функций. Для расчета уровней размерного квантования и принадлежащих им волновых функций мы должны решить уравнение Шредингера (1.28) с условиями (1.31)–(1.32) на каждой гетерогранице (и учесть убывание волновых функций при $z \rightarrow \pm\infty$). В наноструктуре с двумя ямами имеется четыре границы, так что условия (1.31)–(1.32) дают относительно громоздкую систему восьми уравнений. При большем числе ям количество уравнений в такой системе увеличивается, хотя принципиально задача остается простой. Оказывается, можно снизить объем вычислений, если воспользоваться так называемым методом матриц переноса. Ниже будут приведены примеры количественных результатов, полученных этим методом для гетероструктур с двумя квантовыми ямами; сам метод рассматривается в разделе 1.5. Однако для выяснения качественной картины мы сначала разберем приближенную аналитическую модель стационарных состояний в двухъямном потенциале $U(z)$.

Пусть $U_L(z)$ и $U_R(z)$ – потенциалы двух ям (левой и правой), рассматриваемых независимо друг от друга. Здесь удобно считать, что начало отсчета энергии выбрано на уровне барьера, причем каждая из функций $U_L(z)$, $U_R(z)$ отлична от нуля только в пределах своего слоя. Тогда потенциал $U(z)$ для структуры с двумя ямами запишется как сумма одноямных потенциалов $U_L(z)$, $U_R(z)$, и уравнение Шредингера (1.28) в двухъямной задаче с не зависящей от z эффективной массой m примет вид:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi}{dz^2} + U_L\psi + U_R\psi - E^{(z)}\psi = 0, \quad \text{где } E^{(z)} = E - \frac{\hbar^2 K^2}{2m}. \quad (1.99)$$

Полагая $K = 0$, можно опустить индекс z в обозначении энергии E . Предположим, что изолированные друг от друга ямы (разнесенные на большое расстояние) содержат только по одному уровню энергии (E_L и E_R), и что нам известны решения (E_L, ψ_L и E_R, ψ_R) соответствующих одноямных задач:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_L}{dz^2} + U_L\psi_L = E_L\psi_L, \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi_R}{dz^2} + U_R\psi_R = E_R\psi_R. \quad (1.100)$$

Будем искать решение $\psi(z)$ уравнения Шредингера (1.99) в виде линейной комбинации нормированных волновых функций $\psi_L(z)$ и $\psi_R(z)$ с некоторыми коэффициентами C_L и C_R :

$$\psi(z) = C_L\psi_L(z) + C_R\psi_R(z). \quad (1.101)$$

Подставляя выражение (1.101) в уравнение (1.99) и учитывая равенства (1.100), получим:

$$C_L(E_L - E + U_R(z))\psi_L(z) + C_R(E_R - E + U_L(z))\psi_R(z) = 0. \quad (1.102)$$

Отсюда выводится система двух уравнений для неизвестных C_L и C_R : первое уравнение возникает после умножения (1.102) на функцию $\psi_L(z)$ и интегрирования по z , а второе – в результате умножения (1.102) на $\psi_R(z)$ также с последующим интегрированием по z от $-\infty$ до ∞ . Выпишем появляющиеся здесь интегралы, обозначив их угловыми скобками и буквенными символами:

$$\langle \psi_L\psi_L \rangle = 1, \quad \langle \psi_R\psi_R \rangle = 1, \quad (1.103)$$

$$\langle \psi_L U_R \psi_L \rangle = w_L, \quad \langle \psi_R U_L \psi_R \rangle = w_R, \quad (1.104)$$

$$\langle \psi_L U_L \psi_R \rangle = u_L, \quad \langle \psi_R U_R \psi_L \rangle = u_R, \quad (1.105)$$

$$\langle \psi_L \psi_R \rangle = s. \quad (1.106)$$

Интегралы (1.103) равны единице в силу нормировки базисных функций $\psi_L(z)$, $\psi_R(z)$. С учетом (1.103)–(1.106) система уравнений для коэффициентов C_L , C_R записывается в виде:

$$\begin{cases} (E_L + w_L - E) C_L + [(E_R - E) s + u_L] C_R = 0 \\ [(E_L - E) s + u_R] C_L + (E_R + w_R - E) C_R = 0 \end{cases} \quad (1.107)$$

Для того чтобы система однородных уравнений (1.107) имела отличное от нуля решение, необходимо приравнять нулю ее определитель:

$$(E_L + w_L - E)(E_R + w_R - E) - [(E_R - E) s + u_L][(E_L - E) s + u_R] = 0. \quad (1.108)$$

Это условие является алгебраическим уравнением второй степени для переменной E . Два его корня, E_1 , E_2 , представляют собой искомые уровни энергии электрона в двухъямном потенциале $U(z)$. Подставляя поочередно эти корни в (1.107) можно найти два решения системы, $(C_L/C_R)_1$ и $(C_L/C_R)_2$, которыми согласно (1.101) определяются волновые функции $\psi_1(z)$, $\psi_2(z)$, принадлежащие уровням энергии E_1 , E_2 .

Таким образом, в туннельно-связанных ямах уровни энергии смещаются по отношению к уровням изолированных ям, а волновые функции возникают из волновых функций изолированных ям как результат их «перемешивания» – образования линейных комбинаций (1.101).

Нетрудно заметить, что перемешивание функций $\psi_L(z)$ и $\psi_R(z)$ обусловлено недиагональными членами системы (1.107) (выражениями в квадратных скобках); действительно, в отсутствие недиагональных членов система (1.107) имеет лишь такие решения, у которых один из коэффициентов C_L , C_R равен нулю. Поэтому можно упростить систему (1.107), сохранив основные черты ее решений, если пренебречь вкладом с (1.104) и (1.106). То же самое видно из следующих оценок.

Пусть W – масштаб глубины потенциальных ям (значения $U_L(z)$ и $U_R(z)$ в области ям по порядку величины равны $-W$), $1/\gamma$ – масштаб длины проникновения волновых функций $\psi_L(z)$ и $\psi_R(z)$ в область барьера, l – расстояние между ямами. При $l \gg 1/\gamma$ основной вклад в интеграл (1.106) дает область между ямами – в этой области одна из волновых функций

убывает, но другая возрастает: $\psi_L \propto \exp(-\gamma_L z)$, $\psi_R \propto \exp(\gamma_R(z-l))$. Грубая оценка интеграла (1.106), в пренебрежении различием значений $\gamma_L \sim \gamma_R$, имеет вид

$$s \sim \exp(-\gamma l). \quad (1.109)$$

Эта величина экспоненциально мала, если расстояние между ямами l заметно превышает длину $1/\gamma$ подбарьерных хвостов волновых функций. Из курса квантовой механики известно, что экспоненциальное выражение (1.109) служит оценкой для амплитуды вероятности туннельного прохождения электрона сквозь барьер шириной l ; сама вероятность имеет порядок $\exp(-2\gamma l)$. Поэтому безразмерную величину (1.109), называемую интегралом перекрытия волновых функций, можно рассматривать как меру туннельной связи квантовых ям. Грубые оценки для интегралов (1.104)–(1.105) при малой асимметрии ям (малой разнице в их параметрах) имеют вид:

$$w_L \sim w_R \sim -W \exp(-2\gamma l) \sim -Ws^2, \quad (1.110)$$

$$u_L \sim u_R \sim -W \exp(-\gamma l) \sim -Ws. \quad (1.111)$$

Считая, что характерный масштаб энергетических разностей $E_L - E$ и $E_R - E$ по абсолютной величине заключен в пределах от Ws до W , мы теперь пренебрежем в диагональных членах системы (1.107) величинами (1.110), имеющими второй порядок малости по параметру s , а в недиагональных членах удержим только величины (1.111):

$$\begin{cases} (E_L - E) C_L + u_L C_R = 0 \\ u_R C_L + (E_R - E) C_R = 0 \end{cases} \quad (1.112)$$

Приравняв нулю определитель системы уравнений (1.112), получим вместо (1.108) менее громоздкое уравнение

$$(E_L - E)(E_R - E) - u_L u_R = 0. \quad (1.113)$$

Его корни:

$$E_{1,2} = \frac{E_L + E_R}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(E_L - E_R)^2 + 4u_L u_R}. \quad (1.114)$$

Проанализируем выражение для зазора $\Delta E = |E_1 - E_2|$ между уровнями энергии (1.114). Величину $\Delta E_{\text{asym}} = |E_L - E_R|$ можно рассматривать в качестве меры асимметрии двух квантовых ям. Если ее квадрат доминирует под знаком корня в (1.114), то $\Delta E \approx \Delta E_{\text{asym}}$; в этом случае решения системы (1.112) соответствуют волновым функциям ψ_1, ψ_2 , близким к исходным функциям ψ_L, ψ_R , то есть перемешивание волновых функций почти отсутствует. В противоположном случае, когда асимметрия ям пренебрежимо мала, зазор между уровнями (1.114) в туннельно-связанных ямах составляет $\Delta E \approx \Delta E_{\text{tunn}}$, где

$$\Delta E_{\text{tunn}} = 2\sqrt{u_L u_R} \sim W \exp(-\gamma l). \quad (1.115)$$

Формула (1.115) характеризует так называемое *туннельное расщепление* энергетических уровней, практически совпадавших в отсутствие туннельной связи. При этом решения системы (1.112) отвечают сильному перемешиванию исходных волновых функций: по абсолютной величине коэффициенты C_1 и C_2 сравнимы друг с другом. В общем случае совместный результат асимметрии ям и туннельного расщепления, как видно из (1.114)–(1.115), характеризуется формулой

$$\Delta E = \sqrt{(\Delta E_{\text{asym}})^2 + (\Delta E_{\text{tunn}})^2}. \quad (1.116)$$

Рассмотрим подробнее случай двух совершенно симметричных ям, с совпадающими уровнями $E_L = E_R \equiv E_0$. Для таких ям будут одинаковыми те значения параметров (1.104)–(1.105), которые выше различались только наличием индексов L, R , так что эти индексы можно опустить. В этом случае корни квадратного уравнения (1.108) имеют вид:

$$E_1 = E_0 + \frac{w+u}{1+s}, \quad E_2 = E_0 + \frac{w-u}{1-s}. \quad (1.117)$$

При $s \ll 1$ допустимо пренебречь интегралом перекрытия s в знаменателях выражений (1.117); тогда зазор между уровнями (1.117) составит $\Delta E = \Delta E_{\text{tunn}} = 2|u|$. Нижнему уровню энергии, E_1 , отвечает симметричное решение системы (1.107) $C_L = C_R$, а верхнему уровню, E_2 , –

антисимметричное решение $C_L = -C_R$; приближенная система (1.112) в случае симметричных ям ведет к этим же решениям. Таким образом, волновые функции, принадлежащие уровням энергии (1.117), имеют вид:

$$\psi_1(z) = C_1(\psi_L(z) + \psi_R(z)), \quad (1.118)$$

$$\psi_2(z) = C_2(\psi_L(z) - \psi_R(z)), \quad (1.119)$$

где C_1 и C_2 – нормировочные множители. Для волновых функций локализованных состояний $\psi_n(z)$ нормировочные множители обычно определяются условием

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz |\psi_n(z)|^2 = 1. \quad (1.120)$$

С учетом ненулевого значения интеграла перекрытия (1.106) условие (1.120) дает:

$$C_1 = \frac{1}{\sqrt{2(1+s)}}, \quad C_2 = \frac{1}{\sqrt{2(1-s)}}. \quad (1.121)$$

Результаты численного решения уравнения Шредингера (1.28) для двух несимметричных ям приведены на рис. 1.10, а для симметричных ям – на рис. 1.11–1.12.

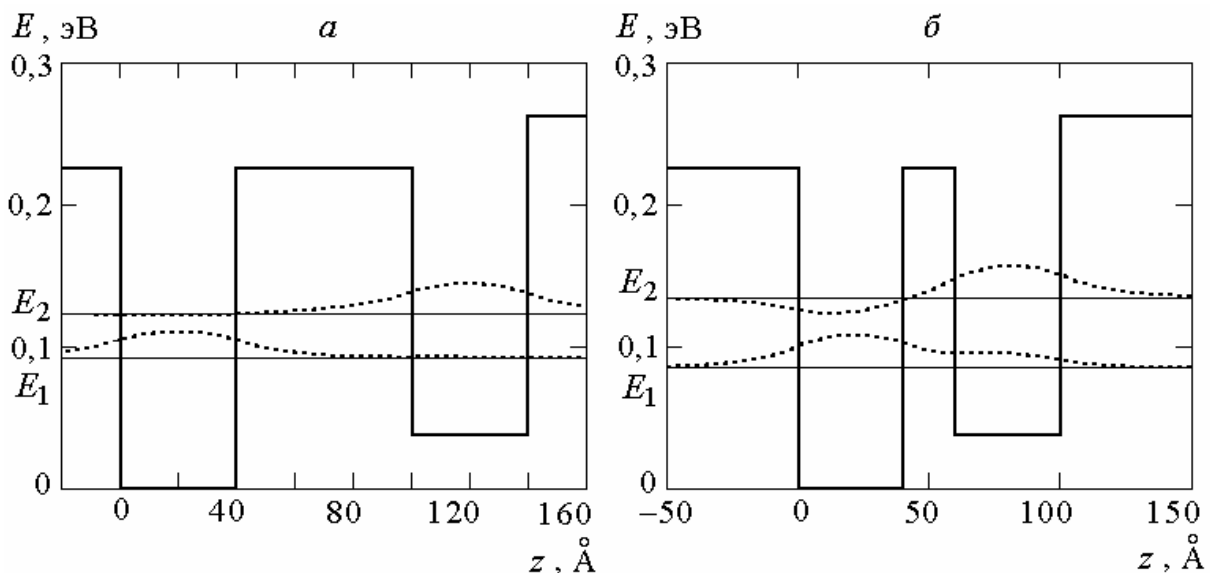


Рис. 1.10. Электронные состояния в несимметричных квантовых ямах. *a* – уровни энергии (тонкие горизонтальные прямые) и волновые функции (пунктирные кривые) в двух несимметричных ямах, разделенных барьером

шириной $l = 60 \text{ \AA}$. При этой ширине барьера перемешивание волновых функций практически отсутствует, а различие в положении уровней энергии почти полностью обусловлено асимметрией ям. б – с уменьшением ширины барьера до значения $l = 20 \text{ \AA}$ возникает перемешивание волновых функций; вследствие туннельного расщепления зазор между уровнями энергии увеличивается.

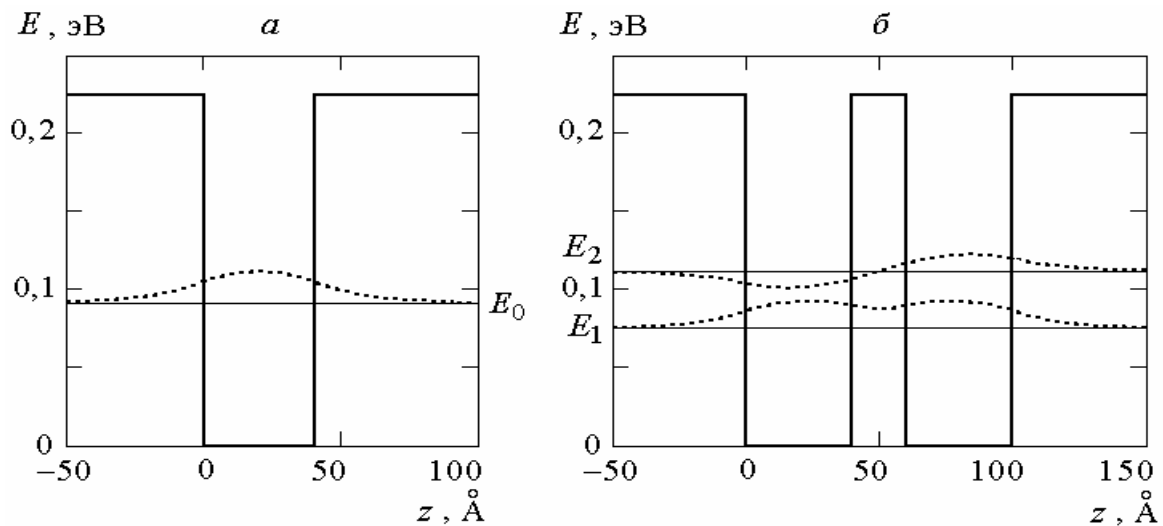


Рис. 1.11. Электронные состояния в симметричных квантовых ямах. a – энергетический уровень E_0 и принадлежащая ему волновая функция электрона в изолированной квантовой яме. б – в случае двух таких ям, расположенных на достаточно малом расстоянии, вместо уровня E_0 вследствие туннельного расщепления возникают два уровня энергии; в приведенном примере ширина барьера между ямами составляет $l = 20 \text{ \AA}$. В симметричных ямах нижнему уровню принадлежит четная волновая функция, верхнему – нечетная волновая функция.

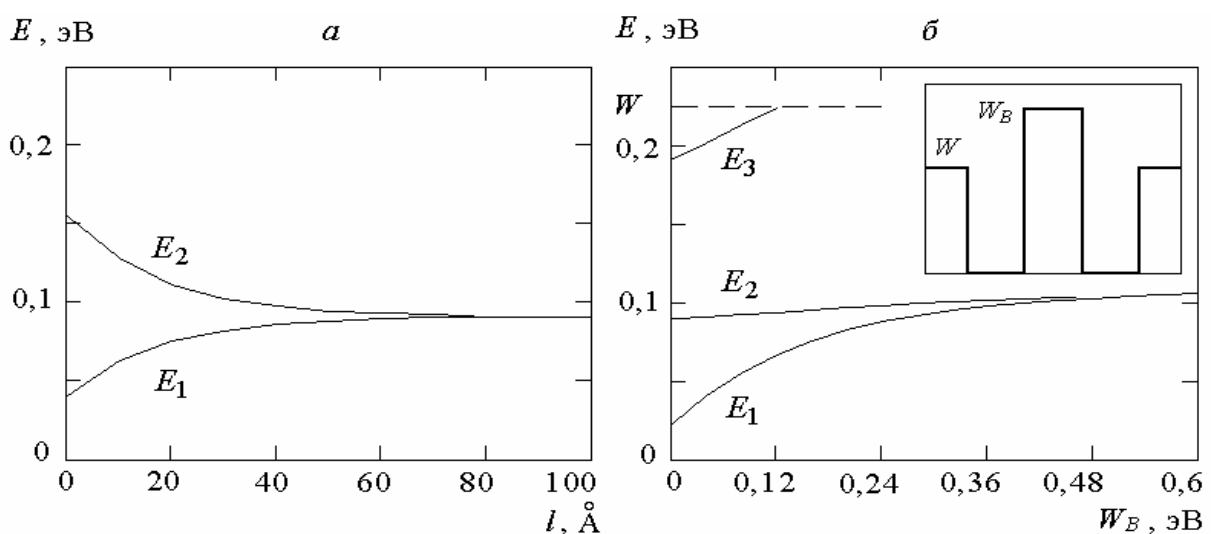


Рис. 1.12. Зависимость энергии туннельно-связанных состояний от параметров барьера.

a – зависимость уровней энергии E_1, E_2 , образующихся при туннельном расщеплении одиночного уровня E_0 , от ширины барьера l между двумя симметричными ямами (показанными на рис. 1.11, б). b – уровни энергии в симметричных туннельно-связанных ямах в зависимости от энергетической высоты разделяющего их барьера W_B с фиксированной шириной $l = 40 \text{ \AA}$; ширина каждой из ям также равна 40 \AA . Ямы и барьер между ними схематично изображены на вставке. При $W_B = 0$ такая структура представляет собой одну квантовую яму шириной 120 \AA с тремя уровнями размерного квантования (такими же, как на рис. 1.4, а). С появлением центрального барьера и последующим увеличением его высоты W_B верхний уровень энергии выталкивается в область континуума, а два нижних уровня объединяются в один уровень, который должен существовать в ямах шириной 40 \AA , изолированных друг от друга бесконечно высоким барьером $W_B \rightarrow \infty$.

1.4. КВАНТОВЫЕ НИТИ И ТОЧКИ

В случае квантовой ямы мал только один из трех геометрических размеров наноструктуры, и поэтому размерное квантование проявляется лишь для одной орбитальной степени свободы электрона – в направлении, перпендикулярном плоскости квантовой ямы; вдоль плоскости квантовой ямы электрон движется свободно. Если же у наноструктуры малы два из трех геометрических размеров, так что неравенству (1.2) удовлетворяют интервалы между уровнями энергии для двух степеней свободы, то движение электрона остается свободным только в одном направлении. Такие системы называются квантовыми нитями (или квантовыми проволоками).

Рассмотрим сначала простейшую модель квантовой нити, считая, что поперечное сечение нити имеет прямоугольную форму (с размерами L_z, L_y , малыми по сравнению с длиной нити L_x), и что внутри нити потенциал равен постоянной величине E_c , а вне нити потенциал бесконечен. В силу последнего предположения решение уравнения Шредингера (1.3) для волновой функции $f(\mathbf{r})$ внутри квантовой нити легко получить методом разделения переменных в декартовых координатах.

1.4.1. Прямоугольная нить и точка с бесконечными барьерами

Действуя так же, как при выводе энергетического спектра (1.25) и волновых функций (1.22) прямоугольной квантовой ямы с бесконечными барьерами, мы получим волновые функции стационарных состояний электрона внутри квантовой нити в виде

$$f(\mathbf{r}) = C \exp(ik_x x) \sin\left(\frac{\pi n_y y}{L_y}\right) \sin\left(\frac{\pi n_z z}{L_z}\right), \quad 0 \leq y \leq L_y, \quad 0 \leq z \leq L_z, \quad (1.122)$$

где C – нормировочная постоянная; вне нити $f(\mathbf{r}) = 0$. В этой модели энергетический спектр электрона в зоне проводимости квантовой нити состоит из неограниченного множества одномерных параболических подзон $E_{n_y, n_z}(k_x)$, пронумерованных парой целых чисел n_y, n_z :

$$E_{n_y, n_z}(k_x) = E_c + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL_y^2} n_y^2 + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL_z^2} n_z^2, \quad n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots \quad (1.123)$$

Если длина нити L_x бесконечна, то волновой вектор k_x непрерывен. Подзоны (1.123) показаны на рис. 1.13; распределение «электронной плотности», определяемое квадратом модуля волновой функции (1.122), изображено на рис. 1.14.

Подобным же образом в наноструктурах с малыми размерами в любом направлении размерное квантование затрагивает все три орбитальные степени свободы электрона. Волновые функции, принадлежащие размерно-квантованным уровням энергии, оказываются полностью локализованными во всех трех измерениях, и поэтому такие системы называются квантовыми точками. Самую простую модель квантовой точки легко получить аналогично рассмотренной выше модели прямоугольной квантовой нити с бесконечными барьерами, если считать малыми все три размера L_x, L_y, L_z такой наноструктуры. Волновые функции электрона, полностью локализованного внутри прямоугольного параллелепипеда с размерами L_x, L_y, L_z , запишутся в форме

$$f(\mathbf{r}) = C \sin\left(\frac{\pi n_x x}{L_x}\right) \sin\left(\frac{\pi n_y y}{L_y}\right) \sin\left(\frac{\pi n_z z}{L_z}\right), \quad (1.124)$$

$$0 \leq x \leq L_x, \quad 0 \leq y \leq L_y, \quad 0 \leq z \leq L_z,$$

а энергетический спектр примет вид

$$E_{n_x, n_y, n_z} = E_c + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL_x^2} n_x^2 + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL_y^2} n_y^2 + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL_z^2} n_z^2, \quad n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots \quad (1.125)$$

В отличие от квантовых ям и квантовых нитей в квантовой точке отсутствуют подзоны размерного квантования – электрон в квантовой точке имеет только дискретные значения энергии; такие уровни энергии нумеруются набором из трех квантовых чисел n_x, n_y, n_z .

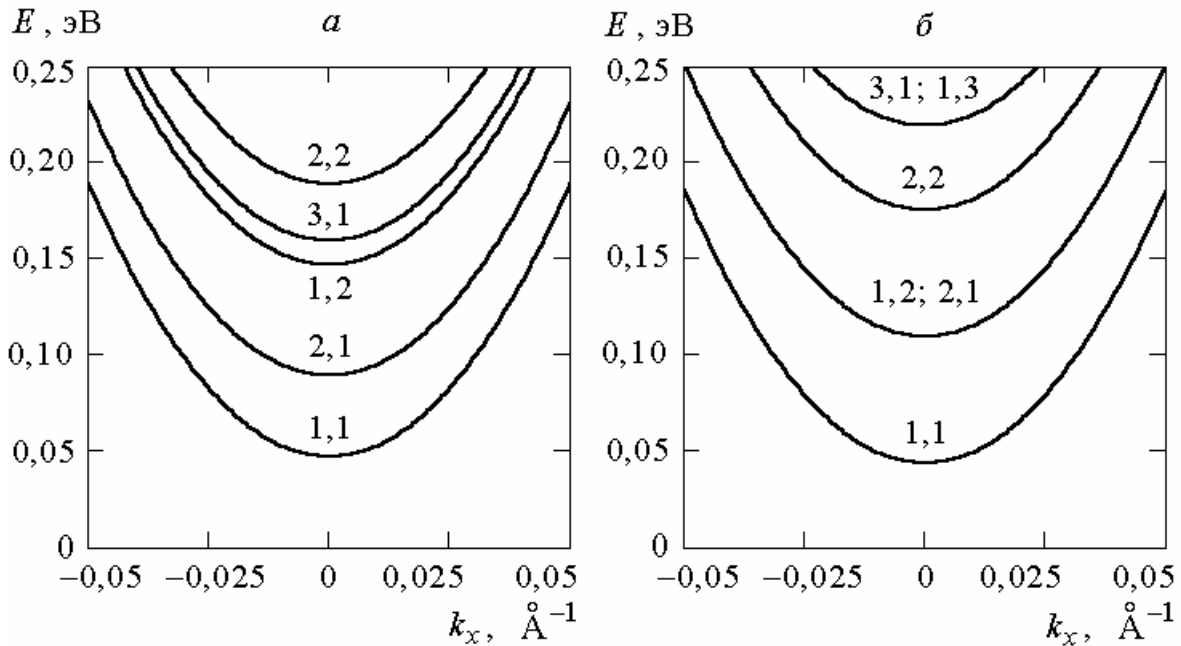


Рис. 1.13. Подзоны размерного квантования в прямоугольной нити. *а* – в нити с различающимися поперечными размерами: $L_y = 200 \text{ \AA}$, $L_z = 130 \text{ \AA}$; эффективная масса электрона $m = 0,067 m_0$, барьеры, удерживающие электрон внутри нити, непроницаемы. Рядом с графиками подзон приведены значения квантовых чисел n_y, n_z . *б* – аналогичные графики ветвей энергетического спектра электрона для случая квантовой нити с квадратным сечением, $L_y = L_z = 160 \text{ \AA}$. В этом случае вследствие повышенной симметрии имеются двукратно вырожденные подзоны.

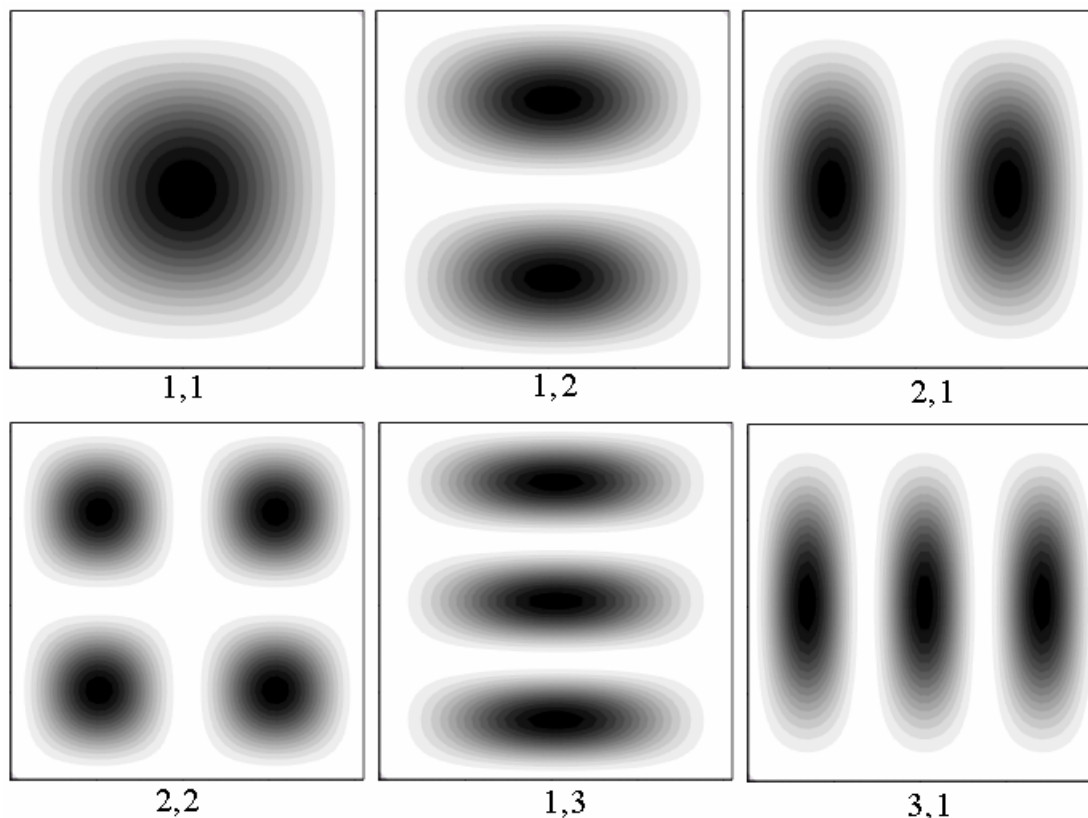


Рис. 1.14. Распределение электронной плотности в поперечном сечении квантовой нити.

Представлено распределение плотности вероятности $|f(\mathbf{r})|^2$ в нити с размерами $L_y = L_z = 160 \text{ \AA}$ для разных значений квантовых чисел n_y, n_z . Ось y направлена горизонтально, ось z – вертикально. К одному и тому же значению энергии относятся те конфигурации, которые переходят друг в друга при преобразованиях симметрии квадрата.

Сделаем несколько замечаний об орбитальном вырождении энергетического спектра квантовой нити (1.123) при $k_x = 0$, а также спектра квантовой точки (1.125), отвлекаясь от двукратного вырождения, обусловленного двумя спиновыми состояниями электрона. Без учета спина основное состояние (состояние с наименьшей энергией) является невырожденным. Действительно, в квантовой нити со спектром (1.123) основному состоянию отвечает единственная комбинация квантовых чисел $n_y = n_z = 1, k_x = 0$, а в квантовой точке со спектром (1.125) – единственный набор $n_x = n_y = n_z = 1$. Если между значениями L_x, L_y, L_z нет специальных соотношений, то и остальные уровни энергии будут невырожденными. Если же наноструктура обладает повышенной симметрией, то любой

уровень энергии с несовпадающими значениями квантовых чисел имеет некоторое вырождение. Например, пусть квантовая нить имеет квадратное сечение, так что $L_y = L_z$. Тогда набору значений $n_y = a$, $n_z = b$ и набору значений $n_y = b$, $n_z = a$ отвечает один и тот же уровень энергии $E_{a,b}(0) = E_{b,a}(0)$ (но две различные, линейно независимые волновые функции) – такие уровни вырождены двукратно. В случае квантовых точек с симметрией куба ($L_x = L_y = L_z$) кратность вырождения может быть больше. Действительно, на одном и том же уровне энергии можно присвоить два значения a , a , b трем квантовым числам n_x , n_y , n_z тремя способами, что соответствует трехкратному вырождению; три разных значения a , b , c распределяются по трем квантовым числам шестью способами, что отвечает шестикратному вырождению энергетического уровня.

Важно, что вид волновой функции для вырожденного уровня не фиксирован раз и навсегда – любая линейная комбинация собственных функций, принадлежащих вырожденному уровню, снова является допустимой волновой функцией стационарного состояния с той же энергией. При этом всякое возмущение, понижающее первоначальную симметрию системы, приводит к расщеплению (частичному или полному) вырожденных уровней энергии и ограничивает свободу выбора волновой функции, то есть оно качественно изменяет картину квантовых состояний.

Модель с бесконечно высокими барьерами удобна для демонстрации основных черт размерного квантования, но она не позволяет оценить количество уровней и их действительное расположение на шкале энергии в реальных структурах.

Для реалистичных оценок высоту барьеров W следует считать конечной величиной; при этом на границах барьеров надо наложить определенные условия на производные волновой функции. Естественным обобщением граничных условий (1.31)–(1.32) служат уравнения [5]

$$f|_A = f|_B, \quad \frac{1}{m} \mathbf{n} \cdot \nabla f \Big|_A = \frac{1}{m} \mathbf{n} \cdot \nabla f \Big|_B, \quad (1.126)$$

где $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ – поле единичных векторов нормали к поверхности, разделяющей материалы А и В.

При конечной высоте барьеров W в материале, окружающем квантовую нить (или квантовую точку), в общем случае не удастся провести разделение переменных, и решения уравнения Шредингера (1.3) с граничными условиями (1.126) могут быть найдены только численными методами. Однако для моделей цилиндрической нити и сферической квантовой точки разделение переменных легко выполняется в цилиндрической или сферической системах координат соответственно. Рассмотрим эти случаи подробнее.

1.4.2. Цилиндрическая квантовая нить

Пусть потенциальная энергия электрона задается выражением

$$U(\mathbf{r}) \equiv U(\rho) = \begin{cases} 0 & \text{при } 0 \leq \rho \leq R \text{ (материал А)}, \\ W & \text{при } \rho > R \text{ (материал В)}, \end{cases} \quad (1.127)$$

где $\rho = \sqrt{y^2 + z^2}$ – радиальная координатная переменная в поперечном сечении нити, R – радиус нити; длина нити вдоль оси x считается бесконечной. Оператор Лапласа, входящий в уравнение Шредингера

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 f(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r})f(\mathbf{r}) = E f(\mathbf{r}), \quad (1.128)$$

в цилиндрической системе координат с осью вращательной симметрии x имеет вид

$$\nabla^2 = \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} + \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2}, \quad (1.129)$$

где φ – угловая переменная в плоскости y, z (так что $y = \rho \cos \varphi$, $z = \rho \sin \varphi$). Эффективная масса электрона m в материалах А и В в общем случае имеет различные значения; будем считать, что $m_A < m_B$.

Ищем решения $f(\mathbf{r})$ в виде

$$f(\mathbf{r}) = e^{ik_x x} e^{iM\varphi} \psi(\rho) \quad (1.130)$$

с не зависящими от координат параметрами k_x и M . Тогда в области А, то есть – внутри нити, уравнение Шредингера (1.128) сводится к следующему уравнению для радиальной волновой функции $\psi(\rho)$:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial \psi}{\partial \rho} + \left(k_A^2 - \frac{M^2}{\rho^2} \right) \psi = 0, \quad 0 \leq \rho \leq R, \quad (1.131)$$

где

$$k_A = \sqrt{\frac{2m_A}{\hbar^2} E - k_x^2}. \quad (1.132)$$

Вводя безразмерную радиальную координату ξ ,

$$\xi = k_A \rho,$$

уравнение (1.131) легко преобразовать к уравнению Бесселя

$$\xi^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial \xi^2} + \xi \frac{\partial \psi}{\partial \xi} + (\xi^2 - M^2) \psi = 0. \quad (1.133)$$

Его общее решение имеет вид линейной комбинации функции Бесселя $J_M(\xi)$ и функции Неймана $N_M(\xi)$ порядка M . Однако функция Неймана обладает особенностью при $\xi \rightarrow 0$, поэтому в ограниченное решение ($|\psi| \neq \infty$) дает вклад только функция Бесселя.

Аналогичным образом в области В уравнение Шредингера сводится к модифицированному уравнению Бесселя для радиальной функции ψ ,

$$\zeta^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial \zeta^2} + \zeta \frac{\partial \psi}{\partial \zeta} + (-\zeta^2 - M^2) \psi = 0, \quad \rho > R, \quad (1.134)$$

с безразмерной координатой ζ :

$$\zeta = \gamma_B \rho, \quad \gamma_B = \sqrt{\frac{2m_B}{\hbar^2} (W - E) + k_x^2}. \quad (1.135)$$

В задаче об уровнях размерного квантования важен интервал энергии $0 < E < W$; в нем $\gamma_B > 0$ – вещественная величина. Общее решение

уравнения (1.134) представляется линейной комбинацией функции Бесселя мнимого аргумента $I_M(\zeta)$ и функции Макдональда $K_M(\zeta)$ порядка M . При $\zeta \rightarrow \infty$ функция $K_M(\zeta)$ экспоненциально убывает, а функция $I_M(\zeta)$ возрастает и поэтому ее вклад в ограниченное решение следует исключить. Таким образом, всюду ограниченное решение имеет вид:

$$\psi(\rho) = \begin{cases} A_1 J_M(k_A \rho), & 0 \leq \rho \leq R, \\ A_2 K_M(\gamma_B \rho), & \rho > R, \end{cases} \quad (1.136)$$

где A_1 и A_2 – постоянные. Отношение A_1/A_2 надо выбрать так, чтобы удовлетворялись граничные условия, следующие из (1.126):

$$\psi|_A = \psi|_B, \quad \left. \frac{1}{m} \frac{d\psi}{d\rho} \right|_A = \left. \frac{1}{m} \frac{d\psi}{d\rho} \right|_B \quad \text{при } \rho = R. \quad (1.137)$$

Подставив (1.136) в (1.137), получим систему однородных уравнений для неизвестных A_1 и A_2 :

$$\begin{cases} J_M(k_A R) A_1 - K_M(\gamma_B R) A_2 = 0 \\ \frac{k_A}{m_A} J'_M(k_A R) A_1 - \frac{\gamma_B}{m_B} K'_M(\gamma_B R) A_2 = 0 \end{cases} \quad (1.138)$$

Здесь штрих означает дифференцирование функции по ее полному аргументу. Приравняв нулю определитель системы (1.138), имеем уравнение, позволяющее находить ветви энергетического спектра $E(k_x)$:

$$\frac{J'_M(k_A R) K_M(\gamma_B R)}{J_M(k_A R) K'_M(\gamma_B R)} = \frac{1}{\beta}, \quad (1.139)$$

где по аналогии с (1.43) введена функция $\beta(E, k_x)$,

$$\beta = k_A m_B / (\gamma_B m_A). \quad (1.140)$$

Примеры решения уравнения (1.139) с несколькими целочисленными значениями M и соответствующие им радиальные функции $\psi(\rho)$ показаны на рис. 1.15–1.16.

Спектр допустимых значений квантового числа M определяется требованием однозначности волновой функции (1.130), $f(x, \varphi, \rho) = f(x, \varphi + 2\pi, \rho)$, вытекающим из того, что координаты x, φ, ρ и $x, \varphi + 2\pi, \rho$ задают одну и ту же точку пространства \mathbf{r} . Отсюда следует уравнение $\exp(i2\pi M) = 1$, означающее, что

$$M = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (1.141)$$

При повороте вокруг оси x на произвольный угол α (то есть при замене аргумента φ на $\varphi - \alpha$) волновая функция (1.130) приобретает фазовый множитель $\exp(-iM\alpha)$. Согласно принципам квантовой механики волновая функция с таким свойством описывает состояние частицы с определенным значением проекции углового момента на ось x , равным M (в единицах \hbar). Таким образом, M – проекция момента импульса.

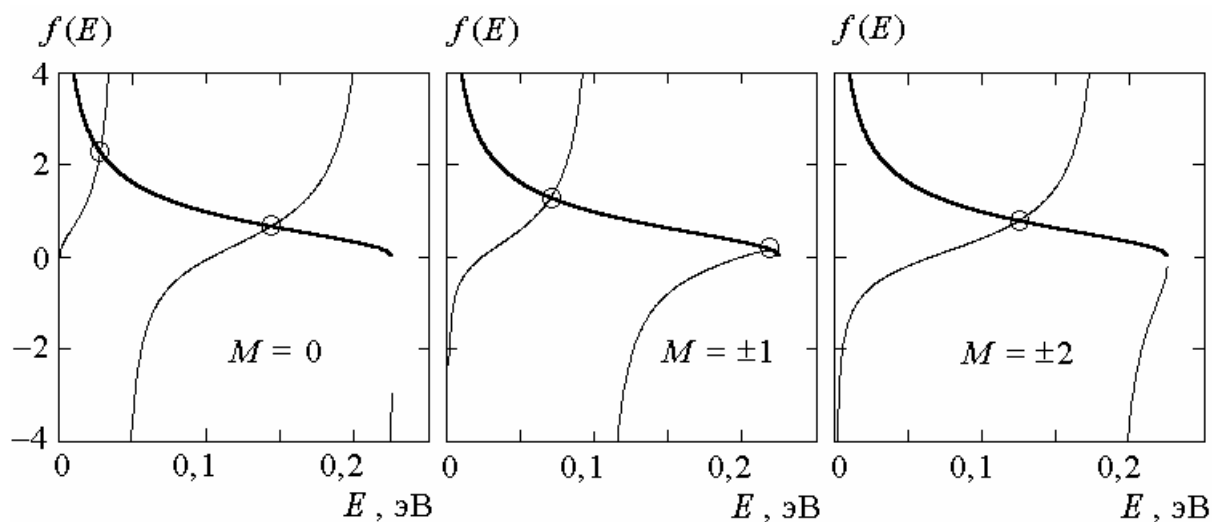


Рис. 1.15. К решению уравнения (1.139).

Тонкие линии – графики выражения в левой части уравнения (1.139), как функции энергии E при $k_x = 0$, $R = 90 \text{ \AA}$, $m_A = 0,067 m_0$, $m_B = 0,092 m_0$, $W = 0,224 \text{ эВ}$. Жирные линии – график функции $1/\beta$ из правой части (1.139). Точки пересечения тонких и жирных линий (выделены кружками) отвечают решениям $E_{n,M}$ – уровням размерного квантования в цилиндрической квантовой нити с конечной высотой барьера W . Видно, что при нулевой проекции орбитального момента, $M = 0$, имеются два уровня: $E_{0,0} = 0,028 \text{ эВ}$ и $E_{1,0} = 0,142 \text{ эВ}$. При $M = \pm 1$ также есть два уровня: $0,07 \text{ эВ}$ и $0,218 \text{ эВ}$. При $M = \pm 2$ есть только один уровень, $0,124 \text{ эВ}$. Аналогичный анализ показывает, что и при $M = \pm 3$ есть один уровень, $0,187 \text{ эВ}$, тогда как при больших значениях проекции момента M уровней нет. С уменьшением радиуса нити R или высоты

барьера W верхние уровни дискретного спектра энергии смещаются в область континуума и исчезают, остается только один уровень: $E_{0,0} \approx W$.

В уравнение Шредингера для радиальной функции $\psi(\rho)$ входит M^2 , поэтому радиальная функция и уровни энергии, определяемые уравнением (1.139), не зависят от знака M (то есть уровни энергии двукратно вырождены по отношению к знаку проекции орбитального момента). При заданном $|M|$ решения $\psi(\rho)$ различаются числом узлов $n = 0, 1, 2, \dots$, которое принято называть радиальным квантовым числом. Таким образом, энергетический спектр электрона в цилиндрической квантовой нити состоит из подзон $E_{n,M}(k_x)$, нумеруемых парой квантовых чисел n, M .

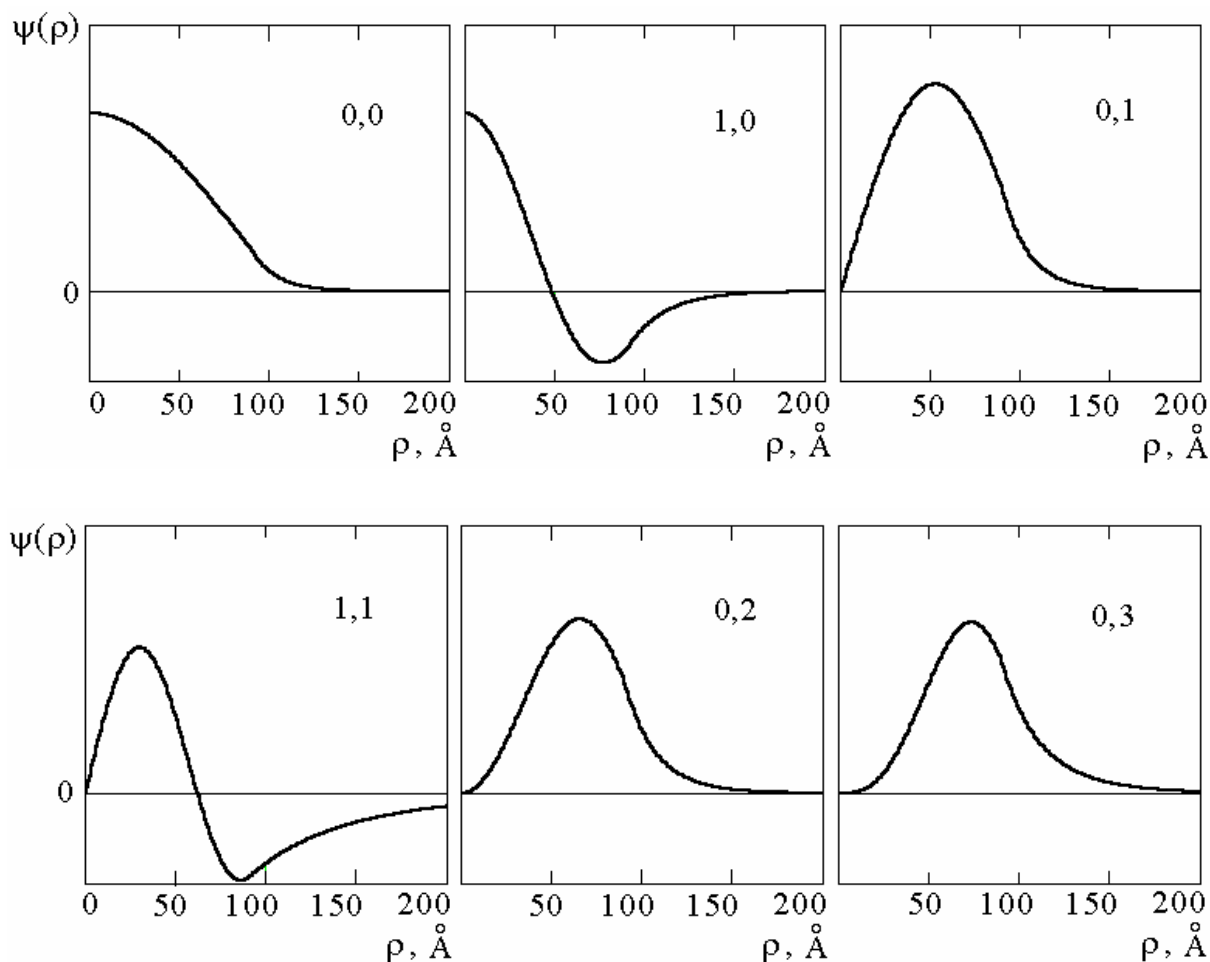


Рис. 1.16. Графики радиальной части $\psi(\rho)$ волновой функции (1.136) при различных значениях квантовых чисел n, M для электрона в цилиндрической квантовой нити с параметрами, указанными в пояснении к рис. 1.15. Число n

равно количеству узлов волновой функции $\psi(\rho)$, а число M определяет поведение функции $\psi(\rho)$ вблизи начала координат: $\psi(\rho) \propto \rho^{|M|}$.

Электронная плотность вероятности $|f(\mathbf{r})|^2$ при выборе волновых функций в виде (1.130) совпадает с $|\psi(\rho)|^2$ и не зависит от угловой координаты φ . Но в силу двукратного вырождения уровня энергии $E_{n,M}$ по отношению к знаку M можно вместо пары волновых функций (1.130) с противоположными знаками M рассматривать решения в виде их линейных комбинаций, например:

$$e^{ik_x x} \cos(|M| \varphi) \psi(\rho), \quad e^{ik_x x} \sin(|M| \varphi) \psi(\rho). \quad (1.142)$$

В этом случае плотность вероятности $|f(\mathbf{r})|^2$ при $M \neq 0$ обладает зависимостью от угла φ (рис. 1.17).

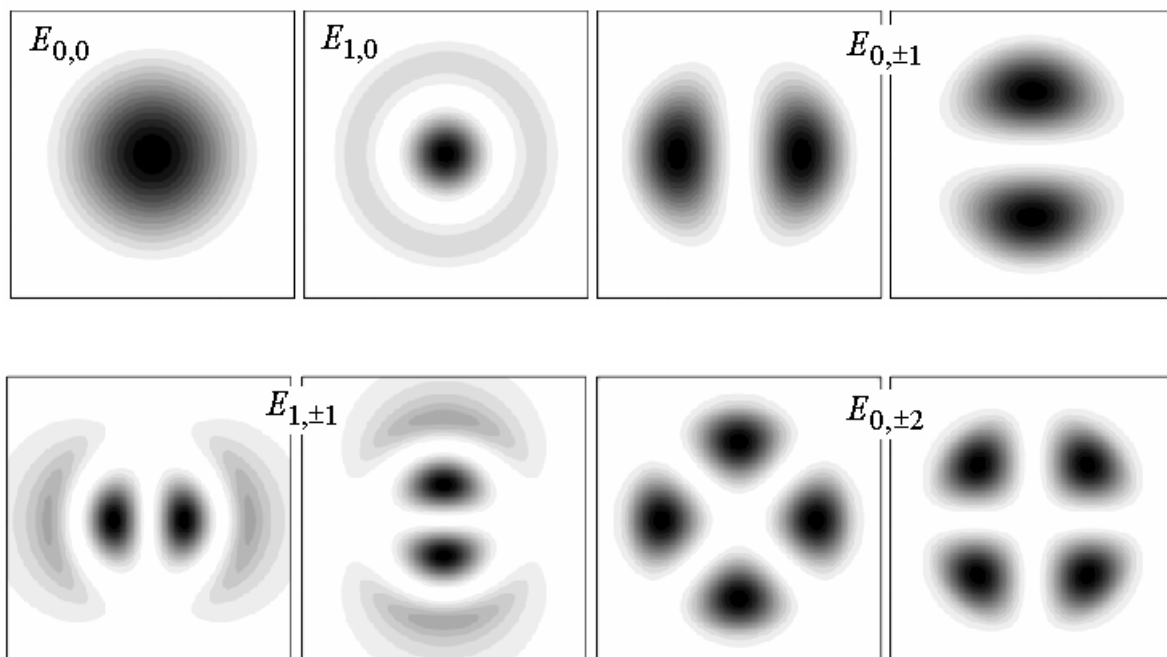


Рис. 1.17. Распределение электронной плотности в поперечном сечении цилиндрической квантовой нити, определяемое квадратом модуля волновых функций (1.142). Параметры нити те же, что и на двух предыдущих рисунках.

1.4.3. Сферическая квантовая точка

Пусть потенциальная энергия электрона задается выражением

$$U(\mathbf{r}) \equiv U(r) = \begin{cases} 0 & \text{при } 0 \leq r \leq R \text{ (материал А)}, \\ W & \text{при } r > R \text{ (материал В)}, \end{cases} \quad (1.143)$$

где $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ – радиальная координатная переменная, R – радиус квантовой точки. В сферической системе координат r, θ, φ , связанной с декартовыми координатами x, y, z соотношениями $x = r \sin \theta \cos \varphi$, $y = r \sin \theta \sin \varphi$, $z = r \cos \theta$, оператор Лапласа имеет вид

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}.$$

Решение уравнения Шредингера (1.128) со сферически симметричным потенциалом подробно разбирается во многих учебниках по квантовой механике, поэтому мы лишь напомним основные шаги. Волновую функцию целесообразно искать в виде

$$f(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \chi(r) Y_{LM}(\theta, \varphi), \quad (1.144)$$

где $Y_{LM}(\theta, \varphi)$ – хорошо известные шаровые функции (их вид никак не связан с конкретным выбором сферически симметричного потенциала $U(r)$), L – орбитальный угловой момент, M – проекция углового момента на ось z :

$$L = 0, 1, 2, \dots, \quad M = L, L-1, \dots, -L.$$

Радиальная функция $\chi(r)$ подчиняется одномерному уравнению Шредингера с так называемым эффективным потенциалом, включающим центробежный вклад, обусловленный угловым моментом L :

$$\chi''(r) + \left(\frac{2m}{\hbar^2} (E - U) - \frac{L(L+1)}{r^2} \right) \chi(r) = 0. \quad (1.145)$$

Для обеспечения ограниченности волновой функции (1.144) при $r \rightarrow 0$ на функцию $\chi(r)$ налагается условие

$$\chi(0) = 0. \quad (1.146)$$

В областях А и В, соответственно, введем две новые радиальные переменные:

$$\xi = k_A r, \quad \zeta = \gamma_B r,$$

где

$$k_A = \sqrt{\frac{2m_A}{\hbar^2} E}, \quad \gamma_B = \sqrt{\frac{2m_B}{\hbar^2} (W - E)}. \quad (1.147)$$

Тогда уравнение (1.145) примет вид

$$\chi''(\xi) + \left(1 - \frac{L(L+1)}{\xi^2} \right) \chi(\xi) = 0, \quad 0 \leq r \leq R, \quad (1.148)$$

$$\chi''(\zeta) + \left(-1 - \frac{L(L+1)}{\zeta^2} \right) \chi(\zeta) = 0, \quad r > R. \quad (1.149)$$

Подстановкой $\chi(\xi) = \xi^{1/2} w(\xi)$ уравнение (1.148) приводится к уравнению Бесселя для новой неизвестной функции $w(\xi)$:

$$\xi^2 w'' + \xi w' + (\xi^2 - (L+1/2)^2) w = 0. \quad (1.150)$$

Его решением, согласующимся с граничным условием (1.146), является функция Бесселя с полуцелым индексом: $w(\xi) = \text{const} \cdot J_{L+1/2}(\xi)$. Уравнение (1.149) тем же путем сводится к модифицированному уравнению Бесселя:

$$\zeta^2 w'' + \zeta w' + (-\zeta^2 - (L + 1/2)^2)w = 0. \quad (1.151)$$

Его решение $w(\zeta)$, обеспечивающее ограниченность волновой функции при $r \rightarrow \infty$, имеет вид функции Макдональда $K_{L+1/2}(\zeta)$ полуцелого индекса.

Таким образом, радиальная часть $\psi(r) \equiv r^{-1}\chi(r)$ волновой функции (1.144) представляется в форме

$$\psi(r) = \begin{cases} A_1 j_L(k_A r), & 0 \leq r \leq R, \\ A_2 \kappa_L(\gamma_B r), & r > R, \end{cases} \quad (1.152)$$

где

$$j_L(\xi) = \frac{1}{\sqrt{\xi}} J_{L+1/2}(\xi), \quad \kappa_L(\zeta) = \frac{1}{\sqrt{\xi}} K_{L+1/2}(\zeta). \quad (1.153)$$

Функции (1.153) иногда называют сферическими функциями Бесселя. Граничные условия, аналогичные (1.137),

$$\psi|_A = \psi|_B, \quad \left. \frac{1}{m} \frac{d\psi}{dr} \right|_A = \left. \frac{1}{m} \frac{d\psi}{dr} \right|_B \quad \text{при } r = R,$$

дают систему однородных уравнений для коэффициентов A_1, A_2 :

$$\begin{cases} j_L(k_A R) A_1 - \kappa_L(\gamma_B R) A_2 = 0 \\ \frac{k_A}{m_A} j'_L(k_A R) A_1 - \frac{\gamma_B}{m_B} \kappa'_L(\gamma_B R) A_2 = 0 \end{cases}. \quad (1.154)$$

Штрих означает взятие производной функции по ее полному аргументу. Приравняв к нулю определитель системы (1.154), получаем уравнение, позволяющее найти уровни энергии E электрона в сферической квантовой точке:

$$\frac{j'_L(k_A R) \kappa_L(\gamma_B R)}{j_L(k_A R) \kappa'_L(\gamma_B R)} = \frac{1}{\beta}, \quad (1.155)$$

где величина β задается выражениями (1.140), (1.147).

Корни $E_{n,L}$ уравнения (1.155) при заданном L можно пронумеровать числом $n = 0, 1, 2, \dots$, равным числу узлов радиальной функции $\psi(r)$. Число L определяет поведение радиальной функции вблизи начала координат: $\psi(r) \propto r^L$. Графики функций $\psi(r)$ для различных уровней энергии $E_{n,L}$ своим видом напоминают кривые на рис 1.16. Полная волновая функция (1.144) с учетом всех трех квантовых чисел n, L, M есть $f(\mathbf{r}) = \psi_{nL}(r)Y_{LM}(\theta, \varphi)$. Энергетические уровни $E_{n,L}$ сферически симметричной системы $(2L+1)$ -кратно вырождены по отношению к квантовому числу M . Положение энергетических уровней в цилиндрической нити и в сферической квантовой точке проиллюстрировано рисунком 1.18.

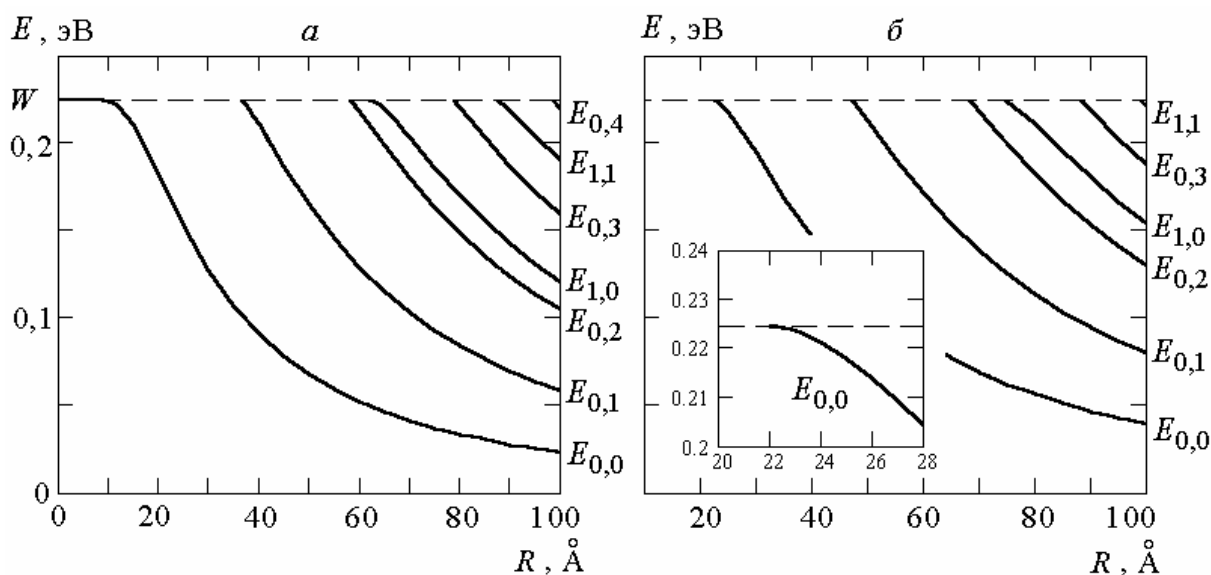


Рис. 1.18. Размерное квантование энергии электрона в цилиндрической нити и в сферической квантовой точке.

a – энергетические уровни $E_{n,|M|}$ квантовой нити в зависимости от ее радиуса R при $k_x = 0$. b – зависимость уровней $E_{n,L}$ от радиуса для сферической квантовой точки; на вставке показано поведение уровня $E_{0,0}$ вблизи точки его возникновения. Эти данные получены в результате численного решения уравнений (1.139) и (1.155) с параметрами $m_A = 0,067 m_0$, $m_B = 0,092 m_0$, $W = 0,224$ эВ.

При уменьшении радиуса R квантовой нити с конечной высотой барьера W количество уровней размерного квантования в ней убывает, однако уровень $E_{0,0}$ не исчезает даже в пределе с $R \rightarrow 0$. В этом пределе можно воспользоваться приближенными выражениями для функций Бесселя в уравнении (1.139)

$$J_0(x) \approx 1, \quad J'_0(x) \approx -x/2, \quad K_0(x) \approx \ln \frac{2}{\gamma x}, \quad K'_0(x) \approx -\frac{1}{x},$$

где $x \ll 1$, $\gamma = 1,781$ – постоянная Эйлера. Это ведет к явной формуле для $E_{0,0}$:

$$E_{0,0} \approx W - \frac{2\hbar^2}{m_B R^2 \gamma^2} \exp\left(-\frac{2\hbar^2}{m_B R^2 W}\right), \quad (1.156)$$

применимой при $m_B R^2 W / \hbar^2 \ll 1$. Таким образом, в тонкой квантовой нити энергия единственного уровня размерного квантования отличается от высоты энергетического барьера W лишь на экспоненциально малую величину.

В случае квантовой точки все уровни исчезают при $R \rightarrow 0$. Для возникновения первого уровня ($E_{0,0}$) величина $m_B R^2 W / \hbar^2$ должна превышать определенное конечное значение; в модели с $m_B = m_A$ оно равно $\pi^2 / 8$. Отметим, что график зависимости $E_{0,0}(R)$ в точке его возникновения касается уровня $E = W$, как видно из вставки на рис. 1.18, б.

1.4.4. Параболическая квантовая точка

Разделение переменных можно выполнить также в некоторых моделях квантовой точки, которые не имеют сферической симметрии и включают изменяющийся в пространстве потенциал [5]. Пусть, например, на электрон в полупроводниковой пленке действует электростатическое поле затвора с цилиндрической симметрией, причем оно локализует движение электрона в плоскости пленки x, y . Нередко такое поле в области

локализации электрона может быть аппроксимировано параболическим потенциалом $U \propto (x^2 + y^2)$. Коэффициент пропорциональности в этом выражении удобно выразить через эффективную массу электрона m и параметр ω_0 с размерностью частоты: $U = m\omega_0^2(x^2 + y^2)/2$. Считая, что в направлении z , перпендикулярном плоскости пленки, электронные состояния $f(\mathbf{r})$ квантуются так же, как в бесконечной прямоугольной яме толщиной d , мы приходим к уравнению

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \frac{1}{2} m \omega_0^2 (x^2 + y^2) \right) f(\mathbf{r}) = E f(\mathbf{r}), \quad 0 < z < d. \quad (1.157)$$

Такое уравнение соответствует известной в курсе квантовой механики задаче о двумерном гармоническом (круговом) осцилляторе. Переменные можно разделить как в цилиндрических, так и декартовых координатах. В последнем случае волновые функции $f(\mathbf{r})$ имеют вид

$$f(x, y, z) = C \sin(k_{n_z} z) \psi_{n_x}(x/a) \psi_{n_y}(y/a), \quad (1.158)$$

где C – нормировочный множитель, $k_{n_z} = \pi n_z / d$, $n_z = 1, 2, 3, \dots$, $a = \sqrt{\hbar / (m\omega_0)}$, $\psi_n(x/a)$ – волновые функции осциллятора, содержащие полиномы Эрмита H_n :

$$\psi_n(\xi) = \exp(-\xi^2/2) H_n(\xi), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (1.159)$$

Энергетический спектр электрона представляется суммой независимых вкладов от степеней свободы z , x и y :

$$E_{n_z, n_x, n_y} = \frac{\pi \hbar^2}{2md^2} n_z^2 + \hbar \omega_0 \left(n_x + \frac{1}{2} \right) + \hbar \omega_0 \left(n_y + \frac{1}{2} \right), \quad n_x, n_y = 0, 1, 2, \dots \quad (1.160)$$

Квантовые числа n_x и n_y входят в (1.160) в виде суммы $n_x + n_y = n$, что ведет к $(n + 1)$ -кратному вырождению этих уровней энергии.

Вследствие указанного вырождения можно рассматривать в качестве волновых функций с заданным значением энергии (1.160) различные линейные комбинации решений (1.158). В силу аксиальной симметрии потенциала $U \propto (x^2 + y^2) \equiv \rho^2$ найдутся и такие комбинации, которые представляют состояния электрона с определенными значениями $M = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$ проекции орбитального момента на ось z . Такие волновые функции $f(\mathbf{r})$ являются решениями уравнения (1.157) в цилиндрических координатах ρ, φ, z ; они могут быть выражены через обобщенные полиномы Лагерра $L_n^m(\xi)$ [5]:

$$f(\rho, \varphi, z) = C \sin(k_{n_z} z) \exp(iM\varphi) (\rho/a)^{|M|} \exp(-\rho^2/(2a^2)) L_{n_\rho+|M|}^{|M|}(\rho^2/a^2),$$

где $n_\rho = 0, 1, 2, \dots$ – число узлов волновой функции по координате ρ . Энергетический спектр (1.160) принимает вид:

$$E_{n_z, M, n_\rho} = \frac{\pi\hbar^2}{2md^2} n_z^2 + \hbar\omega_0(|M| + 2n_\rho + 1) \equiv \frac{\pi\hbar^2}{2md^2} n_z^2 + \hbar\omega_0(n + 1).$$

Представленные этой формулой осцилляторные уровни энергии по-прежнему $(n + 1)$ -кратно вырождены.

1.5. МЕТОД МАТРИЦ ПЕРЕНОСА

1.5.1. Определение матрицы переноса

В этом разделе мы рассмотрим способ вычисления волновых функций в слоистых наноструктурах со ступенчатым потенциалом, называемый методом матриц переноса.

Основу этого метода составляет матричное описание условий сшивания волновых функций и их первых производных на границах слоев.

Условия сшивания представляют собой линейные соотношения между парами коэффициентов A и B в волновых функциях вида (1.11) или (1.38), относящихся к соседним слоям, так что их можно рассматривать как результат линейного преобразования двухкомпонентного вектор-столбца (A, B) некоторой матрицей \hat{t} формата 2×2 . При этом связь между вектор-столбцами двух крайних слоев в многослойной наноструктуре будет описываться произведением t -матриц (матриц переноса), отвечающих заданной последовательности промежуточных слоев. Метод матриц переноса особенно удобен в компьютерных программах, так как современные математические пакеты содержат встроенные подпрограммы для операций с матрицами и комплексными величинами, позволяя нам избежать громоздкого перемножения матриц вручную.

Условимся выбирать координатную ось z в направлении, перпендикулярном плоскости слоев, и будем нумеровать слои слева направо, как показано на рис. 1.19.

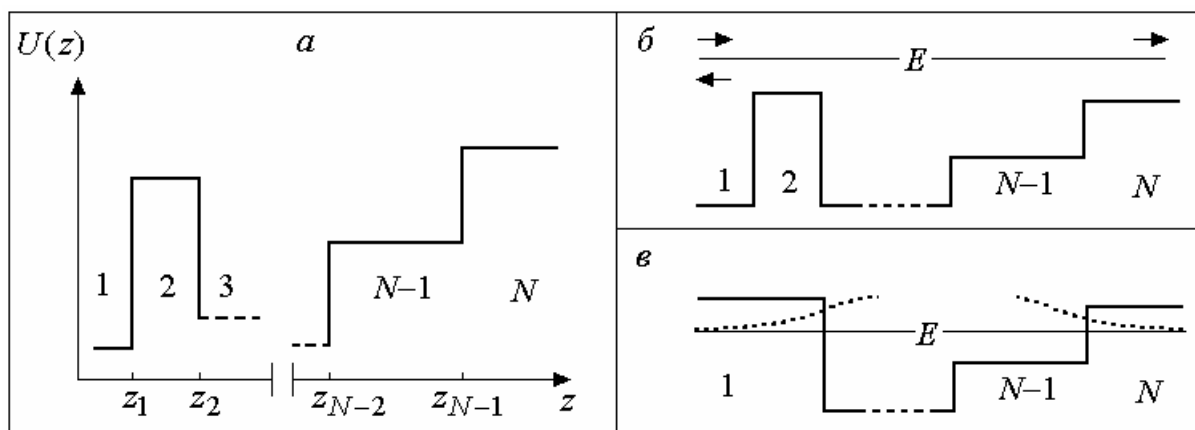


Рис. 1.19. К постановке задач в методе матриц переноса.

a – соответствие между картиной ступенчатого потенциала $U(z)$, номерами слоев и граничными значениями z_n в гетероструктуре с числом слоев N ; $б$ – стрелками изображены потоки падающих, прошедших и отразившихся частиц с энергией E в области континуума. Падающий поток задается произвольным коэффициентом A_1 . Отраженный и прошедший потоки можно найти, вычислив, соответственно, коэффициенты B_1 и A_N при условии $B_N = 0$. $в$ – в области размерно-квантованных состояний волновая функция имеет «хвосты» (схематично изображены пунктирными кривыми), убывающие в глубь крайних слоев, что соответствует условиям $A_1 = 0, B_N = 0$.

В каждом слое решение уравнения Шредингера представляется в форме (1.27),

$$f(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}_{\parallel}} \psi(z),$$

где двумерный волновой вектор \mathbf{K} , параллельный плоскости слоев, не зависит от номера слоя n , а функция $\psi(z)$ от слоя к слою изменяется и в общем случае имеет вид суммы двух экспонент:

$$\psi(z)|_{z_{n-1} < z < z_n} = A_n \exp(ik_n z) + B_n \exp(-ik_n z). \quad (1.161)$$

В этом выражении k_n есть z -компонента волнового вектора электрона:

$$k_n = \sqrt{\frac{2m_n}{\hbar^2}(E - W_n) - K^2}, \quad (1.162)$$

где m_n и W_n – значения эффективной массы электрона и потенциала $U(z)$ в слое с номером n . Мы будем считать, как и выше, что при извлечении квадратного корня (1.162) из положительной величины берется положительное значение корня, а в случае отрицательной величины под корнем волновой вектор k_n становится мнимым с положительной мнимой частью: $k_n = i\gamma_n$, $\gamma_n > 0$. При таком выборе знака корня экспонента с коэффициентом A_n в случае мнимого волнового вектора k_n становится убывающей функцией аргумента z , а экспонента с коэффициентом B_n – возрастающей функцией.

Пусть волновая функция удовлетворяет граничным условиям типа (1.31)–(1.32) в каждой точке $z = z_n$:

$$\psi|_n = \psi|_{n+1}, \quad \frac{1}{m} \frac{d\psi}{dz} \Big|_n = \frac{1}{m} \frac{d\psi}{dz} \Big|_{n+1} \quad \text{при } z \rightarrow z_n. \quad (1.163)$$

Отсюда следуют равенства

$$\begin{cases} A_n e^{ik_n z_n} + B_n e^{-ik_n z_n} = A_{n+1} e^{ik_{n+1} z_n} + B_{n+1} e^{-ik_{n+1} z_n} \\ \frac{ik_n}{m_n} (A_n e^{ik_n z_n} - B_n e^{-ik_n z_n}) = \frac{ik_{n+1}}{m_{n+1}} (A_{n+1} e^{ik_{n+1} z_n} - B_{n+1} e^{-ik_{n+1} z_n}) \end{cases}, \quad (1.164)$$

связывающие друг с другом пары коэффициентов A_n, B_n и A_{n+1}, B_{n+1} .

Существуют различные формулировки метода матриц переноса, поскольку можно рассматривать связь не только между указанными парами коэффициентов, но и между линейными комбинациями этих величин. Ниже речь идет о варианте, в котором вектор-столбец

$$v_n(z) = \begin{pmatrix} a_n(z) \\ b_n(z) \end{pmatrix}$$

в любом слое n строится из функций

$$a_n(z) = \sqrt{\frac{\hbar k_n}{m_n}} A_n e^{ik_n z}, \quad b_n(z) = \sqrt{\frac{\hbar k_n}{m_n}} B_n e^{-ik_n z}. \quad (1.165)$$

Мы будем прослеживать перенос граничных условий справа налево, выражая с помощью t -матриц вектор-столбцы $v_n(z)$ с меньшими номерами n через величины с большими номерами.

При вещественном k_n функции (1.165) интерпретируются как комплексные амплитуды z -составляющих потока вероятности: $|a_n|^2$ есть поток вдоль оси z в n -ом слое, $|b_n|^2$ – поток в противоположном направлении в том же слое. Часто интерес представляет вероятность D прохождения электрона сквозь всю систему слоев или вероятность R отражения от нее. Постановка такой задачи проиллюстрирована рисунком 1.19, б. Вероятности D и R определяются как отношения потоков вероятности

$$D = \frac{|a_N|^2}{|a_1|^2}, \quad R = \frac{|b_1|^2}{|a_1|^2}. \quad (1.166)$$

Они должны удовлетворять тождеству $D + R = 1$, поэтому достаточно вычислить только первую из величин (1.166). Предположим, что найдена матрица переноса \hat{T} для всей системы N слоев, то есть нам известны коэффициенты T_{ik} в уравнениях вида

$$\begin{cases} a_1(z_1) = T_{11}a_N(z_{N-1}) + T_{12}b_N(z_{N-1}) \\ b_1(z_1) = T_{21}a_N(z_{N-1}) + T_{22}b_N(z_{N-1}) \end{cases} \quad (1.167)$$

Поскольку в крайнем правом слое поток частиц в направлении, противоположном оси z , в рассматриваемой постановке задачи отсутствует, необходимо положить $b_N(z_{N-1}) = 0$. При этом из уравнений (1.166)–(1.167) следуют соотношения, связывающие искомые вероятности D и R непосредственно с элементами матрицы \hat{T} :

$$D = \frac{1}{|T_{11}|^2}, \quad R = \left| \frac{T_{21}}{T_{11}} \right|^2. \quad (1.168)$$

Для состояний с дискретным спектром энергии E (при фиксированном K) вероятности D и R теряют смысл; новая постановка задачи показана на рис. 1.19, в. В этих состояниях $b_N(z_{N-1}) = 0$ и $a_1(z_1) = 0$, поэтому первое из уравнений (1.167) сводится к условию $T_{11}a_N = 0$, где $a_N \neq 0$. Следовательно, дисперсионное уравнение для размерно-квантованных уровней энергии $E_n(K)$ может быть записано в виде

$$T_{11}(E, K) = 0. \quad (1.169)$$

Формулы (1.168)–(1.169) показывают, что знание матрицы \hat{T} дает нам много полезной информации об электронных состояниях в слоистой наноструктуре.

Перейдем к вычислению T -матрицы. Сначала найдем матрицу $\hat{t}^{(n, n+1)}$, связывающую соседние вектор-столбцы v_n и v_{n+1} в точке $z = z_n$:

$$v_n(z_n) = \hat{t}^{(n,n+1)} v_{n+1}(z_n). \quad (1.170)$$

Заметим, что с учетом определений (1.165) уравнения (1.164) можно переписать в виде:

$$\begin{cases} a_n(z_n) = \frac{1}{2} \left(\alpha^{n,n+1} + \frac{1}{\alpha^{n,n+1}} \right) a_{n+1}(z_n) + \frac{1}{2} \left(\alpha^{n,n+1} - \frac{1}{\alpha^{n,n+1}} \right) b_{n+1}(z_n) \\ b_n(z_n) = \frac{1}{2} \left(\alpha^{n,n+1} - \frac{1}{\alpha^{n,n+1}} \right) a_{n+1}(z_n) + \frac{1}{2} \left(\alpha^{n,n+1} + \frac{1}{\alpha^{n,n+1}} \right) b_{n+1}(z_n) \end{cases} \quad (1.171)$$

где введено обозначение

$$\alpha^{n,n+1} = \sqrt{\frac{k_n m_{n+1}}{k_{n+1} m_n}}. \quad (1.172)$$

Коэффициенты в уравнениях (1.171) и являются элементами матрицы $\hat{t}^{(n,n+1)}$:

$$\hat{t}^{(n,n+1)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \left(\alpha^{n,n+1} + \frac{1}{\alpha^{n,n+1}} \right) & \frac{1}{2} \left(\alpha^{n,n+1} - \frac{1}{\alpha^{n,n+1}} \right) \\ \frac{1}{2} \left(\alpha^{n,n+1} - \frac{1}{\alpha^{n,n+1}} \right) & \frac{1}{2} \left(\alpha^{n,n+1} + \frac{1}{\alpha^{n,n+1}} \right) \end{pmatrix}. \quad (1.173)$$

Отметим, что определитель матрицы (1.173) равен единице, а обратная матрица может быть получена заменой в (1.173) величин $\alpha^{n,n+1}$ на $\alpha^{n+1,n} = 1/\alpha^{n,n+1}$, так что:

$$(\hat{t}^{(n,n+1)})^{-1} = \hat{t}^{(n+1,n)}.$$

Кроме того, нам потребуется матрица $\hat{t}^{(n,n)}$, связывающая вектор-столбцы на границах одного и того же слоя:

$$v_n(z_{n-1}) = \hat{t}^{(n,n)} v_n(z_n). \quad (1.174)$$

Из выражений (1.165) видно, что

$$a_n(z_{n-1}) = e^{ik_n(z_{n-1}-z_n)} a_n(z_n), \quad b_n(z_{n-1}) = e^{-ik_n(z_{n-1}-z_n)} b_n(z_n).$$

Следовательно,

$$\hat{t}^{(n,n)} = \begin{pmatrix} e^{-ik_n d_n} & 0 \\ 0 & e^{ik_n d_n} \end{pmatrix}, \quad (1.175)$$

где $d_n = z_n - z_{n-1}$ есть толщина n -го слоя. Определитель матрицы (1.175) также равен единице. Обратная матрица может быть получена заменой d_n на $-d_n$. Теперь, последовательно выражая вектор-столбцы $v_n(z)$ с меньшими номерами через вектор-столбцы с большими номерами в соответствующих граничных точках z_n , мы придем к соотношению

$$v_1(z_1) = \hat{t}^{(1,2)} \hat{t}^{(2,2)} \hat{t}^{(2,3)} \dots \hat{t}^{(N-1,N-1)} \hat{t}^{(N-1,N)} v_N(z_{N-1}), \quad (1.176)$$

эквивалентному уравнениям (1.167). Таким образом, искомая T -матрица равна произведению t -матриц типа (1.173) и (1.175):

$$\hat{T} = \hat{t}^{(1,2)} \hat{t}^{(2,2)} \hat{t}^{(2,3)} \dots \hat{t}^{(N-1,N-1)} \hat{t}^{(N-1,N)}. \quad (1.177)$$

Определитель T -матрицы равен единице, поскольку равны единице определители каждого матричного сомножителя в (1.177); такие матрицы называются унимодулярными.

Рассмотрим несколько простых примеров.

1.5.2. Движение электрона в поле прямоугольного барьера

Пусть слои 1 и 3 состоят из материала А, слой 2 образован материалом В и представляет собой барьер для электронов, а других слоев нет (рис. 1.20, а). В этом случае

$$\hat{T} = \hat{t}^{(1,2)} \hat{t}^{(2,2)} \hat{t}^{(2,3)} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} \alpha + \frac{1}{\alpha} & \alpha - \frac{1}{\alpha} \\ \alpha - \frac{1}{\alpha} & \alpha + \frac{1}{\alpha} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-ik_2 l} & 0 \\ 0 & e^{ik_2 l} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\alpha} + \alpha & \frac{1}{\alpha} - \alpha \\ \frac{1}{\alpha} - \alpha & \frac{1}{\alpha} + \alpha \end{pmatrix},$$

где l – толщина слоя 2, $\alpha = \sqrt{k_1 m_2 / (k_2 m_1)}$. Перемножив указанные матрицы, получим:

$$\hat{T} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} \left(\alpha + \frac{1}{\alpha}\right)^2 e^{-ik_2 l} - \left(\alpha - \frac{1}{\alpha}\right)^2 e^{ik_2 l} & \left(\alpha^2 - \frac{1}{\alpha^2}\right) \left(e^{ik_2 l} - e^{-ik_2 l}\right) \\ \left(\alpha^2 - \frac{1}{\alpha^2}\right) \left(e^{-ik_2 l} - e^{ik_2 l}\right) & \left(\alpha + \frac{1}{\alpha}\right)^2 e^{ik_2 l} - \left(\alpha - \frac{1}{\alpha}\right)^2 e^{-ik_2 l} \end{pmatrix}. \quad (1.178)$$

Отсюда видно, что

$$T_{11} = \frac{1}{4} \left(\alpha + \frac{1}{\alpha}\right)^2 e^{-ik_2 l} - \frac{1}{4} \left(\alpha - \frac{1}{\alpha}\right)^2 e^{ik_2 l}. \quad (1.179)$$

Если энергия электрона меньше, чем высота барьера $W_2 \equiv W$, то z -компонента волнового вектора в слое 2 будет мнимой ($k_2 \equiv i\gamma_B$, $k_1 \equiv k_A > 0$), и выражение (1.168) для вероятности прохождения электрона сквозь барьер с учетом (1.179) преобразуется к виду

$$D = \left(1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k_A m_B}{\gamma_B m_A} + \frac{\gamma_B m_A}{k_A m_B}\right)^2 \text{sh}^2 \gamma_B l\right)^{-1}. \quad (1.180)$$

При этом величину D , представляющую собой вероятность туннелирования электрона, часто называют туннельной прозрачностью барьера. В случае достаточно широкого или высокого барьера квадрат гиперболического синуса в (1.180) стремится к $(1/4) \exp(2\gamma_B l) \gg 1$, и можно пользоваться приближенным равенством

$$D = \frac{16(k_A m_B \gamma_B m_A)^2}{((k_A m_B)^2 + (\gamma_B m_A)^2)^2} \exp(-2\gamma_B l). \quad (1.181)$$

Эта формула показывает, что вероятность туннельного проникновения электрона сквозь достаточно мощный барьер экспоненциально убывает с ростом ширины барьера – результат, хорошо известный из курса квантовой механики.

Если волновой вектор в слое 2 вещественен ($k_2 \equiv k_B > 0$, что соответствует движению электрона с энергией $E > W$), то выражение (1.168) для вероятности прохождения электрона над барьером принимает вид

$$D = \left(1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k_A m_B}{k_B m_A} - \frac{k_B m_A}{k_A m_B} \right)^2 \sin^2 k_B l \right)^{-1}. \quad (1.182)$$

Слагаемое, содержащее $\sin^2(k_B l)$, приводит к осцилляциям функции $D(E)$ в области энергий $E > W$ (рис. 1.20, б).

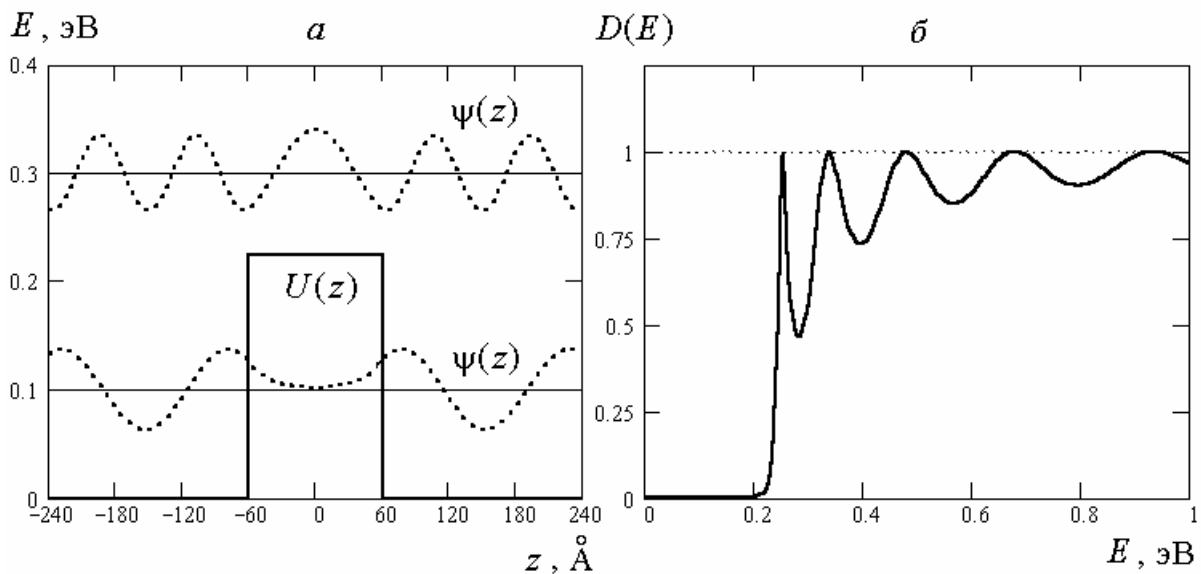


Рис. 1.20. Электронные состояния в присутствии барьера.

a – жирной линией показан симметричный прямоугольный барьер $U(z)$ шириной $l = 120 \text{ \AA}$, пунктиром изображены вещественные симметричные волновые функции стационарных состояний с $K = 0$ для двух значений энергии. *б* – график прозрачности барьера $D(E)$ в зависимости от энергии электрона E при $K = 0$. В области $E < W$ (W – высота барьера) прозрачность экспоненциально мала. В области $E > W$ прозрачность достигает единицы в тех точках, где $\sin(k_B l) = 0$. Расчет выполнен с параметрами $m_A = 0,067 m_0$, $m_B = 0,092 m_0$, $W = 0,224 \text{ эВ}$.

Подчеркнем, что при движении в поле барьера энергетический спектр электрона непрерывен и многократно вырожден вследствие произвольности направления трехмерного волнового вектора. При равной нулю двумерной части волнового вектора ($K = 0$) любой уровень энергии E вырожден двукратно; это проявляется, например, в возможности произвольно задать величину отношения A_2/B_2 . Так, задавая в слое 2 вещественные значения $A_2 = B_2$ и пользуясь t -матрицами для вычисления волновой функции в слоях 1 и 3, мы получим вещественную симметричную волновую функцию $\psi(z)$ (рис. 1.20, *a*), а в случае мнимых $A_2 = -B_2$ – вещественную антисимметричную волновую функцию с той же самой энергией.

1.5.3. Отражение электрона от потенциальной ямы

Полагая в формулах предыдущего примера $k_1 = k_B$, $k_2 = k_A$, мы придем к описанию движения электрона в поле симметричной квантовой ямы глубиной W . Для надбарьерных состояний, то есть для движения с вещественным k_B в области энергий $E > W$ (где E отсчитывается от дна ямы), справедливо приведенное выше замечание о вырождении. Вероятность прохождения электрона над ямой шириной d имеет вид:

$$D = \left(1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k_B m_A}{k_A m_B} - \frac{k_A m_B}{k_B m_A} \right)^2 \sin^2 k_A d \right)^{-1}. \quad (1.183)$$

Графики волновых функций и величины D (1.183) представлены на рис. 1.21.

Из формулы (1.183) видно, что в общем случае функция $D(E)$ обращается в нуль на границе континуума, то есть – при $k_B \rightarrow 0$ (при $E \rightarrow W$, если $K = 0$). При этом величина волновой функции с энергией $E \approx W$ мала внутри ямы по сравнению с ее значениями вне ямы. Исключение представляют случаи, в которых толщина ямы d удовлетворяет условию $\sin(k_A d) = 0$ при $E = W$, так что

$$\sqrt{2m_A W / \hbar^2} d = \pi n, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.184)$$

В таких случаях $D(W) = 1$, причем одна из волновых функций с энергией $E = W$ оказывается внутри ямы не малой: при четном n не малой становится четная (симметричная) волновая функция, при нечетном n – нечетная (антисимметричная). Это легко понять, заметив, что в рассматриваемой ситуации производная волновой функции на границах ямы обращается в нуль и, следовательно, граничные условия для производных ведут к выравниванию размаха осцилляций волновой функции $\psi(z)$ во всех областях оси z . Ямы, удовлетворяющие какому-либо из условий (1.184), называют «резонансными» для, соответственно, четных или нечетных состояний.

1.5.4. Квантование энергии электрона в потенциальной яме

При движении электрона в квантовой яме с энергией $E < W$ потоки вероятности в областях 1 и 3 равны нулю, коэффициенты прохождения и отражения (D , R) утрачивает смысл. В этой области энергии могут существовать только размерно-квантованные состояния, удовлетворяющие уравнению (1.169).

Рассмотрим уравнение $T_{11} = 0$, пользуясь выражением для элемента матрицы переноса T_{11} типа (1.179):

$$\left(\alpha + \frac{1}{\alpha}\right)^2 e^{-ik_2 d} - \left(\alpha - \frac{1}{\alpha}\right)^2 e^{ik_2 d} = 0. \quad (1.185)$$

Здесь d – толщина квантовой ямы, $\alpha = \sqrt{k_1 m_2 / (k_2 m_1)}$, $k_1 \equiv i\gamma_B$, $k_2 \equiv k_A$, так что

$$\alpha^2 = \frac{i\gamma_B m_A}{k_A m_B} = \frac{i}{\beta}, \quad (1.186)$$

где величина β введена в соответствии с формулой (1.43). Легко заметить, что с учетом (1.186) уравнение (1.185) приводится к известной нам форме (1.45) или (1.46):

$$((1/\beta) - \beta) \sin(k_A d) + 2 \cos(k_A d) = 0. \quad (1.187)$$

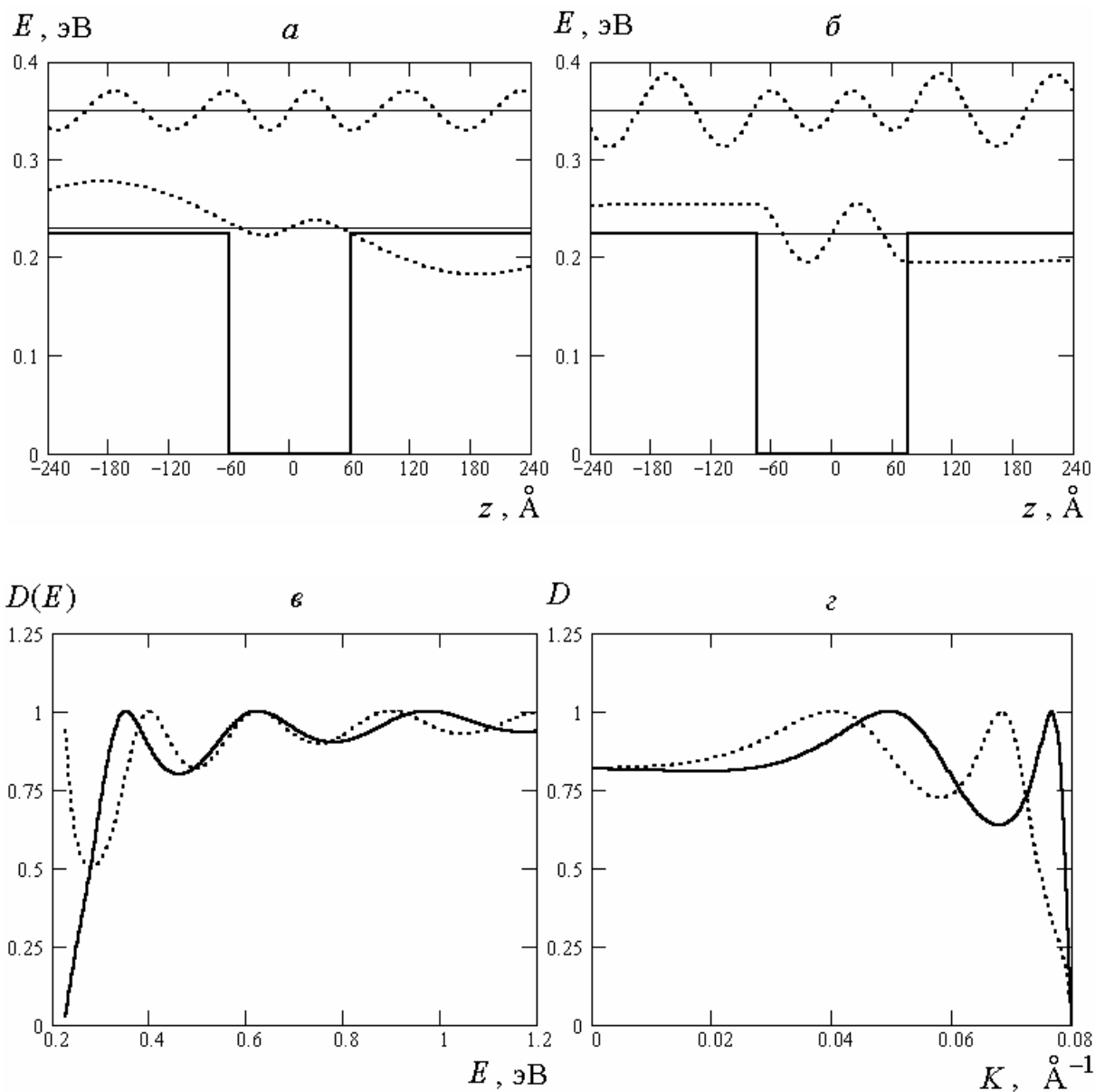


Рис. 1.21. Электронные состояния с непрерывным спектром энергии в потенциальном поле квантовой ямы.

a – жирной линией изображена потенциальная яма шириной $d = 120 \text{ \AA}$, пунктиром показаны нечетные волновые функции $\psi(z)$ стационарных состояний с $K = 0$ при двух значениях энергии. *б* – то же самое для ямы шириной $d = 150 \text{ \AA}$; в этом случае яма оказывается резонансной для нечетных состояний с энергией $E \approx W$. *в* – вероятность $D(E)$ прохождения электрона над ямой в зависимости от энергии: сплошная линия – график при $d = 120 \text{ \AA}$, пунктир – при $d = 150 \text{ \AA}$ (резонансная яма). *г* – аналогичные графики зависимости $D(K)$ при $E = 0,49 \text{ эВ}$ в области вещественных значений k_B . Значения параметров: $m_A = 0,067 m_0$, $m_B = 0,092 m_0$, $W = 0,224 \text{ эВ}$.

Уравнение (1.187) рассматривалось в разделе 1.2.2. Таким образом, мы убеждаемся, что условие $T_{11} = 0$ действительно имеет смысл дисперсионного уравнения – в данном примере оно позволяет вычислять уровни энергии $E_n(K)$ электронных состояний, локализованных в симметричной квантовой яме. Аналогичным образом определяется энергетический спектр электронов в квантовых ямах более сложного вида, состоящих из многих слоев: сначала следует построить T -матрицу, описывающую конкретную структуру, а затем решить уравнение $T_{11} = 0$.

1.6. РЕЗОНАНСНОЕ ТУННЕЛИРОВАНИЕ

Рассмотрим движение электрона в пятислойной наноструктуре, в которой слои 1, 3, 5 образованы материалом А, а слои 2 и 4 образованы материалом В, причем эти два слоя создают для электрона двойной симметричный барьер высотой W . Исходя из классического представления о том, что вероятность преодоления двух барьеров равна произведению вероятностей преодоления каждого из них, следовало бы ожидать, что прозрачность симметричного двойного барьера есть $D(E) = (D_0(E))^2$, где $D_0(E)$ – прозрачность одиночного барьера. Поскольку при $E < W$ прозрачность одиночного барьера быстро убывает с понижением энергии электрона (рис. 1.20, б), можно было бы тогда заключить, что система с двумя барьерами становится для электрона с малой энергией практически непреодолимым препятствием.

Однако движение электрона подчиняется квантовым законам, и для его исследования существенна аналогия с картиной интерференции волн. Если считать, что область пространства между барьерами подобна «резонатору» – в ней выделены определенные значения дебройлевской длины волны и, следовательно, энергии, – то мы придем к выводу, что при определенных значениях энергии вероятность туннелирования $D(E)$ должна иметь особенности. Именно это и демонстрируют результаты количественного анализа (полученные методом матриц переноса), которые представлены на рис. 1.22.

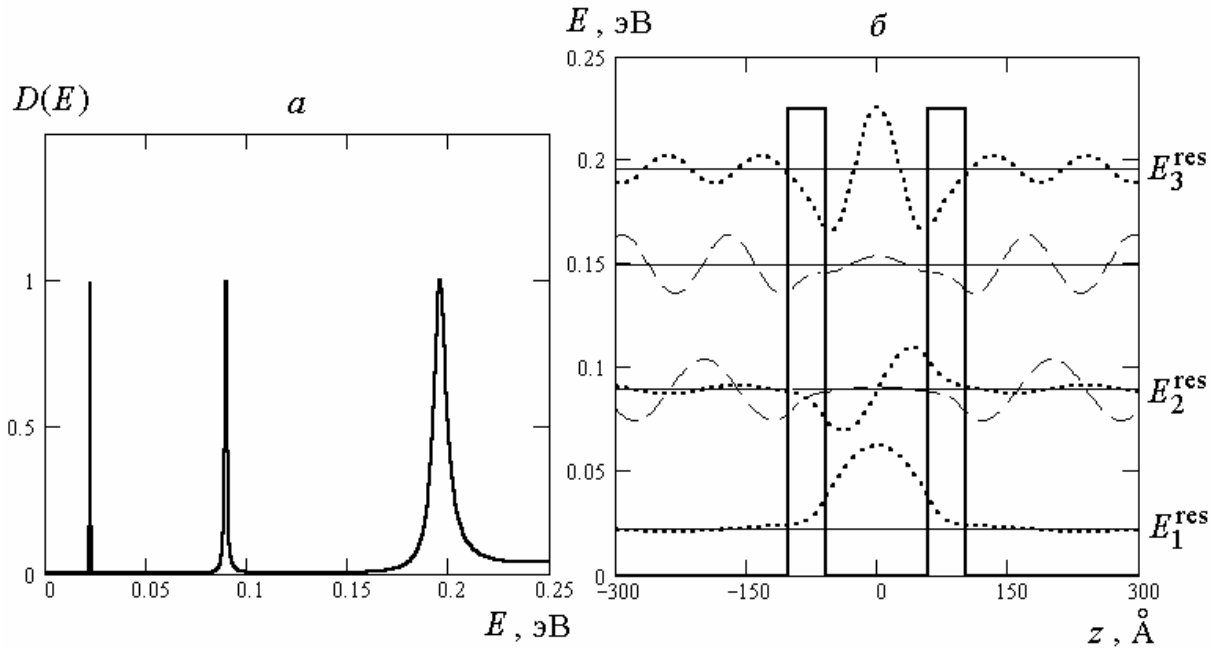


Рис. 1.22. Резонансное туннелирование электрона.

a – туннельная прозрачность $D(E)$ двойного симметричного барьера имеет резкие максимумы для некоторых уровней энергии электрона $E = E_n^{\text{res}}$, лежащих ниже уровня барьера $W = 0,224$ эВ. b – жирной линией показан потенциальный рельеф двойного барьера $U(z)$. Пунктирными линиями изображены вещественные волновые функции резонансных стационарных состояний, (принадлежащих уровням E_n^{res}), штриховыми линиями – волновые функции обычных, нерезонансных стационарных состояний. Расчеты выполнены при $K = 0$, $m_A = 0,067 m_0$, $m_B = 0,092 m_0$, $l = 40 \text{ \AA}$ – ширина каждого из двух барьеров, $d = 120 \text{ \AA}$ – ширина квантовой ямы между барьерами.

В рассмотренном на рис. 1.22, a примере вероятность $D(E)$ проникновения электрона сквозь двойной барьер резко увеличивается (достигая в максимумах единицы) в окрестности выделенных значений энергии $E = E_n^{\text{res}}$. Этот эффект называется резонансным туннелированием. Он тесно связан с существованием в яме между барьерами так называемых квазистационарных состояний электрона.

Понять происхождение резонансного туннелирования помогают графики волновых функций, показанные на рис. 1.22, b . Мы видим, что при $E = E_n^{\text{res}}$ имеются стационарные состояния, очень похожие на локализованные состояния с энергией E_n в изолированной яме, окруженной неограниченно широкими барьерами (см. рис. 1.4, a). Нижнему уровню (E_1^{res}) принадлежит четная волновая функция, не

имеющая узлов внутри ямы; следующему уровню (E_2^{res}) отвечает нечетная волновая функция с одним узлом, и так далее. Эти функции убывают в глубь барьеров по обе стороны от центра ямы. Однако они «не успевают» полностью обратиться в нуль и, выйдя за пределы барьеров конечной ширины, снова продолжают осциллировать. Подобный же вид должны иметь состояния с близкими значениями энергии $E \approx E_n^{\text{res}}$, поскольку в данной задаче энергетический спектр непрерывен, и малое изменение параметра E может привести лишь к малому изменению решения $\psi(z)$ уравнения Шредингера с заданным E . Таким образом, резонансные состояния характеризуются увеличением волновой функции в области между барьерами. Естественно думать, что именно наличие таких состояний является причиной резкого повышения вероятности туннелирования при $E \approx E_n^{\text{res}}$. И наоборот, для значений энергии, далеких от E_n^{res} (или при выборе волновой функции, не похожей на локализованное состояние в одиночной яме с энергией $E \approx E_n^{\text{res}}$ – см. штриховой график для четной волновой функции уровня $E = E_2^{\text{res}}$ на рис. 1.22, б) величина волновой функции между барьерами подавлена. Это ассоциируется с малой вероятностью туннелирования при нерезонансных значениях энергии.

Чтобы исследовать форму пиков туннельной прозрачности $D(E)$, показанной на рис. 1.22, а, найдем для $D(E)$ явное выражение в области $E \approx E_n^{\text{res}}$. Если элементы матрицы (1.178), описывающей туннелирование электрона сквозь одиночный барьер шириной l , обозначить как a , b , c и f , то T -матрица для структуры с двойным симметричным барьером запишется в виде:

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-ik_A d} & 0 \\ 0 & e^{ik_A d} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a & b \\ c & f \end{pmatrix}, \quad (1.188)$$

где d – ширина ямы между барьерами. Перемножив указанные здесь матрицы, получим

$$T_{11} = a^2 e^{-ik_A d} + bc e^{ik_A d}. \quad (1.189)$$

Обозначим посредством δ фазу комплексной величины a , так что $a = |a| \exp(i\delta)$,

$$\operatorname{tg} \delta = \frac{\operatorname{Im} a}{\operatorname{Re} a} = \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\beta} - \beta \right) \frac{\operatorname{sh} \gamma_B l}{\operatorname{ch} \gamma_B l}, \quad (1.190)$$

где, как обычно, $\beta = k_A m_B / (\gamma_B m_A)$. Тогда

$$|T_{11}|^2 = |a|^4 + (bc)^2 + 2|a|^2 bc \cos(2k_A d - 2\delta).$$

После несложных преобразований с учетом равенства $|a|^2 - bc = 1$, обусловленного унимодулярностью матрицы (1.188), находим следующее выражение для туннельной прозрачности $D(E)$ двухбарьерной структуры:

$$D = |T_{11}|^{-2} = \left(1 + 4|a|^2 bc \cos^2(k_A d - \delta) \right)^{-1}. \quad (1.191)$$

Как видно из (1.191), прозрачность D симметричного двойного барьера обращается в единицу при тех значениях энергии электрона E , которые являются корнями (E_n^{res}) уравнения $\cos(k_A d - \delta) = 0$, или, что эквивалентно,

$$\cos(k_A d) + \operatorname{tg} \delta \sin(k_A d) = 0. \quad (1.192)$$

Рассмотрим случай широких барьеров, когда величина $\gamma_B l$ заметно превышает единицу. В этом случае отношение гиперболических функций в (1.190) приблизительно равно единице; следовательно,

$$\operatorname{tg} \delta \approx \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\beta} - \beta \right),$$

и уравнение (1.192) переходит в хорошо известное нам уравнение (1.187), которым определяются уровни энергии E_n электронных состояний, локализованных в изолированной квантовой яме. Таким образом, $E_n^{\text{res}} \approx E_n$, то есть значения энергии, при которых возникает резонансное туннелирование электрона, должны приблизительно совпадать с уровнями

локализованных состояний в изолированной яме, окруженной неограниченно широкими барьерами.

В выражении (1.191) разложим $\cos^2(k_A d - \delta)$ в ряд по степеням $E - E_n^{\text{res}}$ в окрестности любого из уровней E_n^{res} и ограничимся первым неисчезающим членом:

$$\cos^2(k_A d - \delta) \approx \left(\frac{d(k_A d - \delta)}{dE} \right)_{E=E_n^{\text{res}}}^2 (E - E_n^{\text{res}})^2.$$

В таком приближении зависимость туннельной прозрачности (1.191) от энергии может быть представлена формулой

$$D(E) = \frac{\Gamma_n^2 / 4}{(E - E_n^{\text{res}})^2 + \Gamma_n^2 / 4}, \quad (1.193)$$

где параметр Γ_n определяется соотношением

$$\Gamma_n^{-2} = |a|^2 bc \left(\frac{d(k_A d - \delta)}{dE} \right)^2, \quad E = E_n^{\text{res}}. \quad (1.194)$$

В случае широких барьеров справедливо приближенное равенство:

$$|a|^2 bc = \left(\frac{1}{16} \left(\frac{1}{\beta} + \beta \right)^2 e^{2\gamma_B l} \right)^2 = \frac{1}{D_n^2}, \quad (1.195)$$

D_n – туннельная прозрачность одиночного барьера (1.181) на уровне энергии $E = E_n^{\text{res}}$. Учитывая (1.195) и пренебрегая в (1.194) энергетической зависимостью фазы δ , получаем для величины Γ_n приближенную формулу

$$\Gamma_n = \hbar D_n \frac{v_n}{d}, \quad (1.196)$$

где

$$v_n = \frac{1}{\hbar} \left(\frac{dk_A}{dE} \right)_{E=E_n^{\text{res}}}^{-1} \quad (1.197)$$

есть z -компонента скорости электрона в потенциальной яме между барьерами.

Таким образом, пики вероятности $D(E)$, соответствующие резонансному туннелированию электрона, имеют *лоренцеву* форму (1.193) и характеризуются эффективной шириной Γ_n , которая может быть оценена по формуле (1.196). Приемлемость этой аппроксимации иллюстрирует рис. 1.23.

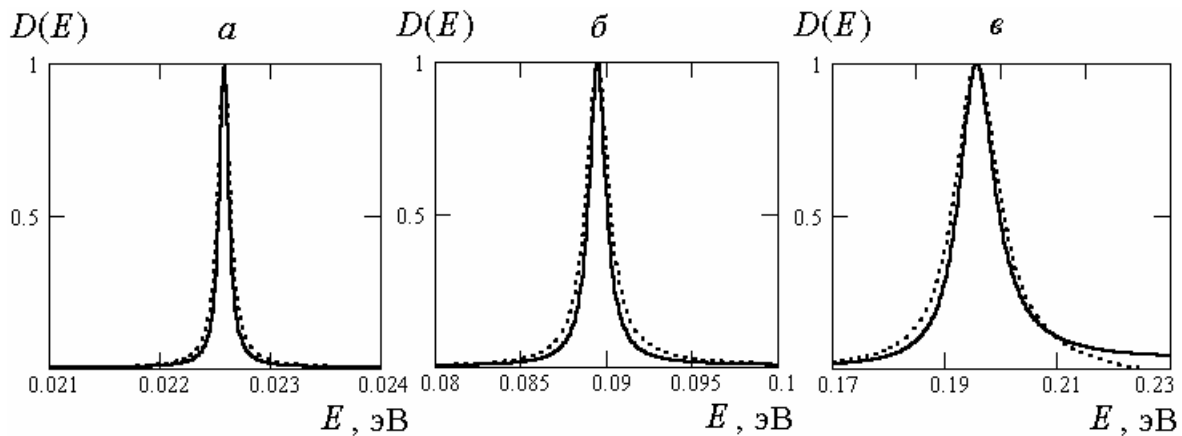


Рис. 1.23. Сравнение графиков туннельной прозрачности $D(E)$ двойного симметричного барьера, построенных по точной формуле (1.191) (сплошные кривые) и в приближении лоренцевского пика (1.193) (пунктирные кривые) с шириной Γ_n (1.196). Графики получены для резонансных уровней энергии $E = E_n^{\text{res}}$, найденных как корни уравнения (1.192): $a - E_1^{\text{res}} = 0,0226$ эВ, $\Gamma_1 = 1,3 \cdot 10^{-4}$ эВ; $б - E_2^{\text{res}} = 0,0894$ эВ, $\Gamma_2 = 1,6 \cdot 10^{-3}$ эВ; $в - E_3^{\text{res}} = 0,196$ эВ, $\Gamma_3 = 9,4 \cdot 10^{-3}$ эВ. В этих расчетах использованы те же значения параметров наноструктуры, что и на рис. 1.22.

Выражение (1.196) для ширины лоренцевского пика (1.193) находит естественное объяснение в рамках представлений о квазистационарных состояниях; подробное обсуждение квазистационарных состояний имеется в книге [10]. Квазистационарным называют состояние, которое в отличие от стационарного состояния характеризуется конечным временем жизни τ

и вследствие этого обладает квантовой неопределенностью энергии $\Gamma = \hbar/\tau$. Обычно величина Γ мала по сравнению со средней энергией состояния. В нашем примере квазистационарное состояние электрона можно представлять себе как такую суперпозицию волновых функций со значениями энергии E вблизи одного из уровней E_n^{res} , которая в начальный момент времени $t = 0$ полностью локализована внутри квантовой ямы между барьерами. С течением времени это состояние «распадается» – в результате туннелирования сквозь барьеры электрон покидает яму. Для оценки обратного времени жизни $1/\tau$ электрона в яме следует умножить вероятность D_n туннельного проникновения через одиночный барьер на число ударов v_n/d электрона в единицу времени о край барьера. Как видно, эти соображения ведут прямо к формуле (1.196). При этом рост Γ с повышением энергии объясняется тем, что с ростом E_n^{res} увеличивается как прозрачность барьеров D_n , так и скорость электрона v_n .

В случае несимметричных барьеров аналитическое описание резонансного туннелирования становится более сложным, однако отмеченные выше качественные черты сохраняются: туннельная прозрачность $D(E)$ имеет максимумы приблизительно лоренцевой формы при значениях энергии, близких к дискретным уровням E_n стационарных состояний в соответствующей яме с бесконечно широкими барьерами. Значения D в максимумах не достигают единицы в случае несимметричных барьеров, что иллюстрируется примером, показанным на рис. 1.24.

В силу двукратного вырождения уровней энергии, соответствующих инфинитному (не ограниченному конечной областью пространства) движению с $K = 0$, волновые функции любого стационарного состояния могут иметь вид произвольной линейной комбинации двух независимых решений с одной и той же энергией E . Для предшествующих рисунков мы выбирали вещественные комбинации, что было удобно для их сравнения с волновыми функциями локализованных состояний, принадлежащих дискретным уровням в одиночных ямах. В поле $U(z)$ несимметричного двойного барьера, изображенном на рис. 1.24, б, также имеются вещественные решения $\psi(z)$, которые при резонансных значениях энергии напоминают своим видом локализованные волновые функции, показанные

на рис. 1.7, б. Однако на этот раз мы привели графики другого типа, в большей степени отражающие картину туннелирования.

Строго говоря, динамику туннельного проникновения электрона сквозь барьер, как и движение над барьерами или ямами, следовало бы описывать перемещающимися в пространстве волновыми пакетами – нестационарными решениями волнового уравнения Шредингера, построенными в форме интегральной суперпозиции комплексных стационарных решений для близких значений энергии [10]. Но расчет волновых пакетов громоздок, и вместо них удобнее рассматривать комплексные стационарные решения. Характер комплексного решения $\psi(z)$ вполне передается графиком функции $|\psi(z)|^2$. При туннелировании слева направо комплексные решения, из которых составляется волновой пакет, в области $z \rightarrow +\infty$ имеют вид бегущих слева направо плоских волн $\psi(z) = A \exp(ikz - iEt/\hbar)$. В этой области $|\psi(z)|^2 = |A|^2$ – константа, которая характеризует интенсивность прошедшей через барьеры волны или, другими словами, вероятность обнаружения электрона справа от барьеров. В области слева от любого из имеющихся барьеров возникает интерференция падающей и отраженной волн, и функция $|\psi(z)|^2$ становится осциллирующей. Размах таких осцилляций позволяет нам судить о вероятности обнаружения электрона в рассматриваемой области пространства.

Графики $|\psi(z)|^2$, представленные на рис. 1.24, б, показывают, что при $E \neq E_n^{\text{res}}$ электронная волна почти не проникает в яму между барьерами, и интенсивность прошедшей направо волны оказывается малой по сравнению с интенсивностью падающей и отраженных волн. При $E = E_n^{\text{res}}$, напротив, вероятность обнаружения электрона в яме между барьерами становится высокой, и поэтому прошедшая волна оказывается сравнимой по величине с падающей волной – имеет место резонансное туннелирование. Такое увеличение электронной плотности в яме между барьерами указывает на существование в ней квазистационарных состояний с энергией $E \approx E_n^{\text{res}}$, обладающих относительно большим временем жизни.

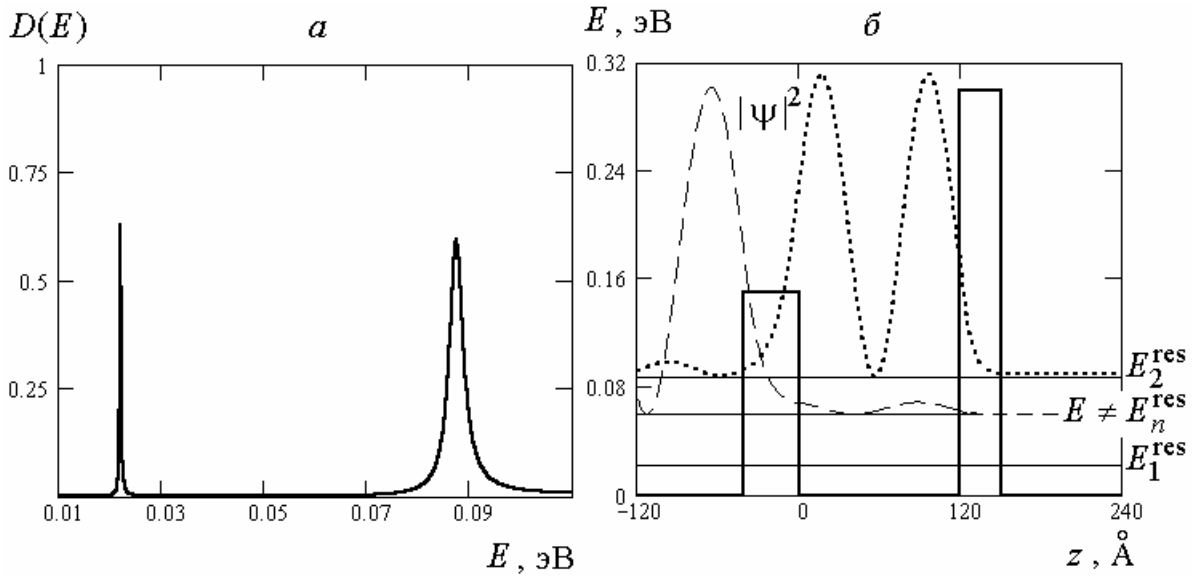


Рис. 1.24. Резонансное туннелирование электрона сквозь несимметричный двойной барьер.

a – туннельная прозрачность $D(E)$ двойного несимметричного барьера, *б* – жирной линией показан потенциальный рельеф $U(z)$ этого барьера.

Пунктиром изображен график квадрата модуля $|\psi(z)|^2$ комплексной волновой функции стационарного состояния с резонансным значением энергии $E = E_2^{res}$. Штриховая линия – аналогичный график для стационарного состояния с нерезонансным значением энергии E из интервала $E_1^{res} < E < E_2^{res}$. Эти графики характеризуют распределение электронной плотности по оси z при туннелировании слева направо. Уровни E_1^{res} , E_2^{res} близки к дискретным уровням E_1 , E_2 на рис. 1.7, *б* для изолированной ямы с несимметричными барьерами. Расчеты выполнены при $K = 0$; $m_A = 0,067 m_0$ для ям, $m_{B1} = 0,084 m_0$, $W_1 = 0,15$ эВ, $l_1 = 40$ Å для левого барьера, $m_{B2} = 0,1 m_0$, $W_2 = 0,3$ эВ, $l_2 = 30$ Å для правого барьера, $d = 120$ Å – ширина ямы между барьерами.

1.7. СВЕРХРЕШЕТКИ

Если в наноструктуре число чередующихся слоев полупроводников А и В велико, то структуру называют сверхрешеткой (superlattice). При строго периодическом чередовании слоев действующий на электроны потенциал $U(z)$ обладает трансляционной симметрией с периодом сверхрешетки a_{SL} :

$$U(z + a_{SL}) = U(z). \quad (1.198)$$

Наличие этой дополнительной симметрии приводит к возникновению характерного для сверхрешеток энергетического спектра (рис. 1.25, а), что можно пояснить следующим образом [11].

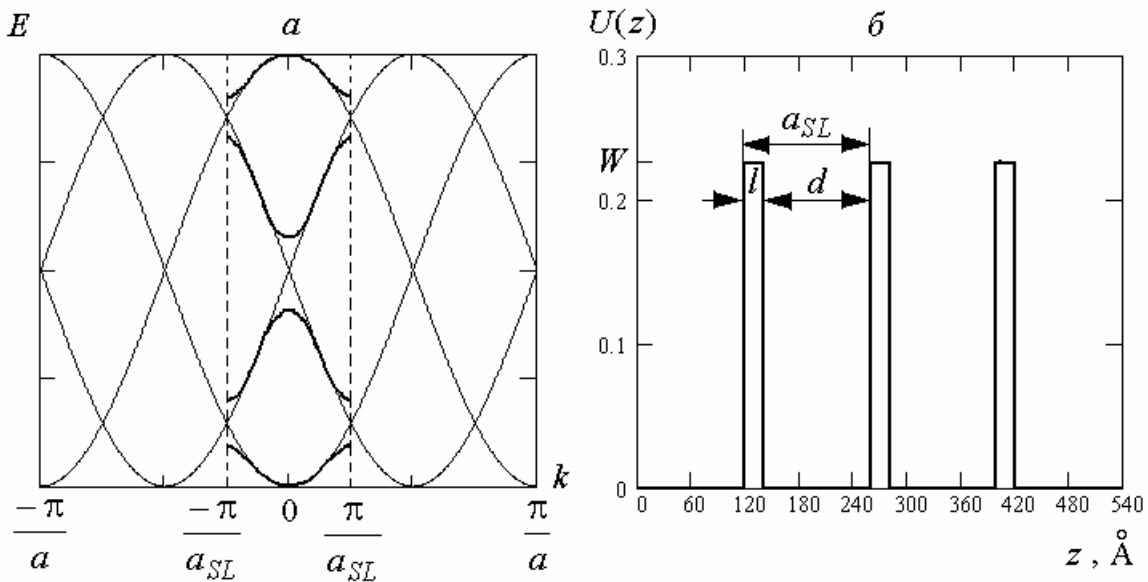


Рис. 1.25. Образование электронных минизон в сверхрешетках.

a – тонкими линиями изображено семейство кривых $E(k + 2\pi n/a_{SL})$, где $E(k) = \Delta E(1 - \cos(ka))$, ΔE – ширина зоны проводимости, n – целые числа. Жирными линиями схематично показаны минизоны, возникающие в зоне проводимости, пунктир – зона Бриллюэна сверхрешетки. b – ступенчатая модель периодического потенциала в зоне проводимости; значения параметров: $W = 0,224$ эВ – высота барьеров, $l = 20$ Å – ширина барьера, $d = 120$ Å – ширина квантовой ямы между барьерами, $a_{SL} = l + d = 140$ Å – период сверхрешетки.

Хорошо известно, что в объемном (однородном) кристалле энергетический спектр электрона $E(\mathbf{k})$ обладает зонным характером в силу периодичности функции $E(\mathbf{k})$ по отношению к трансляциям волнового вектора на любой из векторов обратной решетки. Так, в одномерной модели кристалла с периодом решетки Браве a функция $E(k)$ должна иметь период $2\pi/a$, и поэтому энергетический спектр электрона состоит из отдельных зон с периодической зависимостью от k , например, как у периодической функции $\cos(ka)$. При этом для перечисления всех не совпадающих друг с другом электронных состояний достаточно рассматривать на оси k первую зону Бриллюэна: $-\pi/a < k < \pi/a$. Подобным же образом трансляционная симметрия сверхрешетки (1.198)

требует, во-первых, периодичности кривой $E(k_z)$ с периодом $2\pi/a_{SL}$ в каждой из уже имеющихся кристаллических зон. Необходимую периодичность имеет семейство пересекающихся кривых $E(k_z + 2\pi n/a_{SL})$, полученное трансляциями первоначальной кривой $E(k_z)$, кратными $2\pi/a_{SL}$. Во вторых, зона Бриллюэна становится существенно более узкой: $-\pi/a_{SL} < k_z < \pi/a_{SL}$. И в третьих, потенциал (1.198) изменяет первоначальную форму кривых так, что снимается вырождение – устраняются возникшие пересечения ветвей энергетического спектра. В результате, в сверхрешетке энергетический спектр носителей тока оказывается расщепленным на *минизоны*, отделенные друг от друга энергетическими зазорами.

Для количественного расчета электронных минизон в модели периодической сверхрешетки со ступенчатым потенциалом (рис. 1.25, б) воспользуемся методом матриц переноса. Сначала рассмотрим три области: пусть слои 1 и 3, выращенные из материала А, представляют для электрона потенциальную яму, а слой 2, образованный материалом В, является барьером. Тогда слою 2 будет соответствовать матрица (1.178), описывающая прохождение электрона через барьер. Если элементы этой матрицы обозначить как a , b , c и f , то T -матрица для пары слоев, описывающая прохождение электрона через барьер шириной l и соседнюю яму шириной d , запишется в виде:

$$\hat{T} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & f \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-ik_A d} & 0 \\ 0 & e^{ik_A d} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a e^{-ik_A d} & b e^{ik_A d} \\ c e^{-ik_A d} & f e^{ik_A d} \end{pmatrix}, \quad (1.199)$$

где

$$a = \frac{1}{4\alpha^2} \left((\alpha^2 + 1)^2 e^{-ik_B l} - (\alpha^2 - 1)^2 e^{ik_B l} \right),$$

$$b = -c = \frac{1}{4} \left(\alpha^2 - \frac{1}{\alpha^2} \right) \left(e^{ik_B l} - e^{-ik_B l} \right),$$

$$f = \frac{1}{4\alpha^2} \left((\alpha^2 + 1)^2 e^{ik_B l} - (\alpha^2 - 1)^2 e^{-ik_B l} \right),$$

$$\alpha^2 = \frac{k_A m_B}{k_B m_A}. \quad (1.200)$$

Учтем теперь, что волновые функции электрона в периодическом потенциале должны удовлетворять *теореме Блоха*. В нашем примере это означает, что при трансляции вдоль оси z на период сверхрешетки $a_{SL}=l+d$ волновая функция должна приобретать фазовый множитель $\exp(iqa_{SL})$,

$$\psi(z + a_{SL}) = e^{iqa_{SL}} \psi(z), \quad (1.201)$$

где $\hbar q$ – z -компонента квазиимпульса электрона в сверхрешетке. В отличие от величин k_A, k_B (см. (1.162)) квазиимпульс $\hbar q$ не зависит от параметров слоя и выступает в качестве квантового числа электронного состояния $\psi(z)$. В терминах вектор-столбцов $v_n(z)$ с компонентами (1.165) условие (1.201) можно записать в виде:

$$v_1(z_1) = e^{-iqa_{SL}} v_3(z_3), \quad (1.202)$$

причем:

$$v_1(z_1) = \hat{T} v_3(z_3). \quad (1.203)$$

Следовательно, компоненты вектор-столбца $v_3(z_3)$ удовлетворяют системе однородных линейных уравнений:

$$\left(\hat{T} - e^{-iqa_{SL}} \hat{1} \right) v_3 = 0. \quad (1.204)$$

Для того чтобы такая система имела отличное от нуля решение, ее определитель должен равняться нулю:

$$\det \left(\hat{T} - e^{-iqa_{SL}} \hat{1} \right) = 0. \quad (1.205)$$

Условие (1.205) служит дисперсионным уравнением (ДУ), которым в рассматриваемой модели определяется электронный энергетический

спектр сверхрешетки $E(K, q)$; здесь, как и всюду выше, $\hbar K$ – величина двумерной составляющей импульса, параллельной слоям.

С учетом свойства унимодулярности матрицы (1.199) ($T_{11}T_{22} - T_{12}T_{21} = 1$) уравнение (1.205) приводится к виду

$$F(E) = \cos(qa_{SL}), \quad (1.206)$$

где

$$F(E) \equiv \frac{1}{2}(T_{11} + T_{22}). \quad (1.207)$$

Для примера рассмотрим ДУ (1.206) с $K=0$ в области значений энергии, не превышающих высоту барьеров ($E < W$, рис. 1.25, б). В этом случае

$$k_A = \sqrt{\frac{2m_A}{\hbar^2} E}, \quad k_B = i\gamma_B = i\sqrt{\frac{2m_B}{\hbar^2} (W - E)},$$

так что функция (1.207) имеет вид

$$F(E) = \text{ch}(\gamma_B l) \cos(k_A d) + (\gamma_B^2 m_A^2 - k_A^2 m_B^2) (2k_A \gamma_B m_A m_B)^{-1} \text{sh}(\gamma_B l) \sin(k_A d) \quad (1.208)$$

Решения ДУ (1.206) с функцией (1.208) имеют вид минизон $E_n(q)$, образующихся вблизи тех значений энергии E_n , которые отвечают уровням размерного квантования в одиночной квантовой яме шириной d с высотой барьеров W при бесконечной протяженности барьеров ($l \rightarrow \infty$). Такой результат легко понять, если вспомнить картину резонансного туннелирования электронов, рассмотренную в разделе 1.6. Действительно, можно сказать, что указанные минизоны возникают в тех интервалах энергии, где электрон способен перемещаться из ямы в яму посредством туннельного эффекта. По аналогии с шириной пика резонансного туннелирования ширина минизоны оказывается тем меньшей, чем ниже на шкале энергии располагается данная минизона. Понятно также, что ширина минизон убывает с ростом толщины барьеров l . Перечисленные здесь свойства минизон иллюстрирует рис. 1. 26.

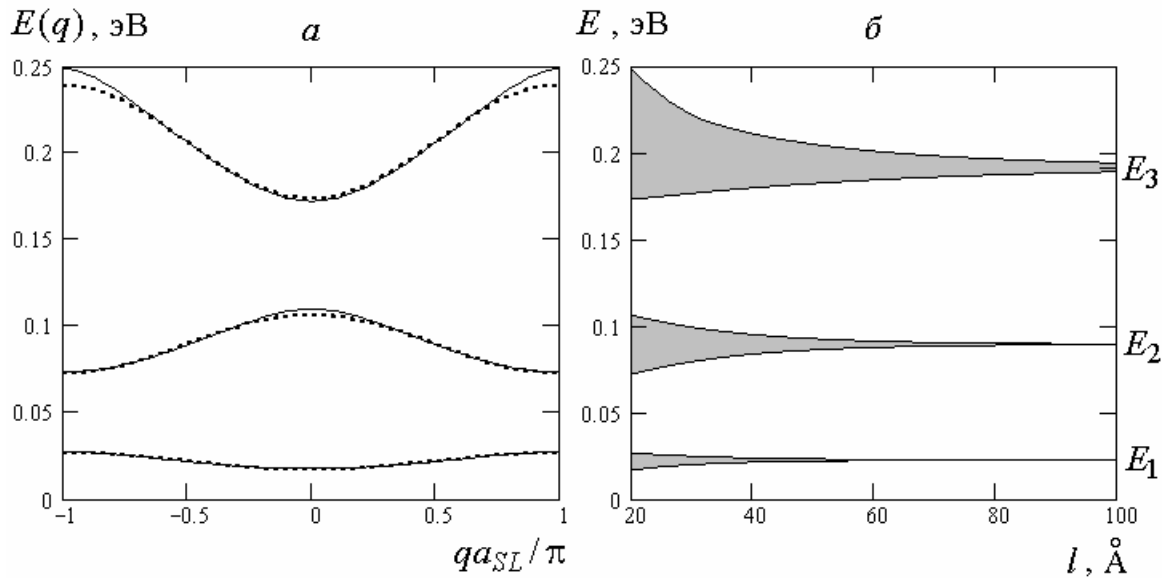


Рис. 1.26. Электронные минизоны в области барьеров.

a – сплошными кривыми показаны три нижние минизоны $E_n(q)$ при $K=0$, найденные численно из ДУ (1.206)–(1.208). Пунктир – аппроксимация зависимости $E_n(q)$ формулой (1.209). Параметры потенциала указаны на рис. 1.25, *б*; значения масс: $m_A=0,067 m_0$, $m_B=0,092 m_0$. *б* – ширина минизон как функция толщины l туннельных барьеров. При $l \rightarrow \infty$ края минизон стремятся к значениям уровней размерного квантования E_n в одиночной квантовой яме.

Для расчета минизоны с относительно небольшой шириной можно ограничиться в ДУ (1.206) первыми членами разложения функции $F(E)$ в ряд по степеням $E - E_n$:

$$F(E) \approx F(E_n) + F'(E_n)(E - E_n).$$

Это приводит к приближенному (но зато явному) описанию закона дисперсии минизоны $E_n(q)$ – он имеет характер синусоиды:

$$E = E_n - F(E_n)/F'(E_n) + (F'(E_n))^{-1} \cos(qa_{SL}). \quad (1.209)$$

Как известно, аналогичный характер имеет закон дисперсии электрона в нижних энергетических зонах однородного кристалла (с периодом решетки a вместо периода сверхрешетки a_{SL}), определяемых в приближении сильной связи.

В области значений энергии, превышающих высоту барьеров ($E > W$, рис. 1.25, б), величины k_A, k_B вещественны, и функция (1.207) имеет вид:

$$F(E) = \cos(k_B l) \cos(k_A d) - (k_B^2 m_A^2 + k_A^2 m_B^2) (2k_A k_B m_A m_B)^{-1} \sin(k_B l) \sin(k_A d) .$$

Минизоны, образующиеся в этой области энергий, показаны на рис. 1.27, а.

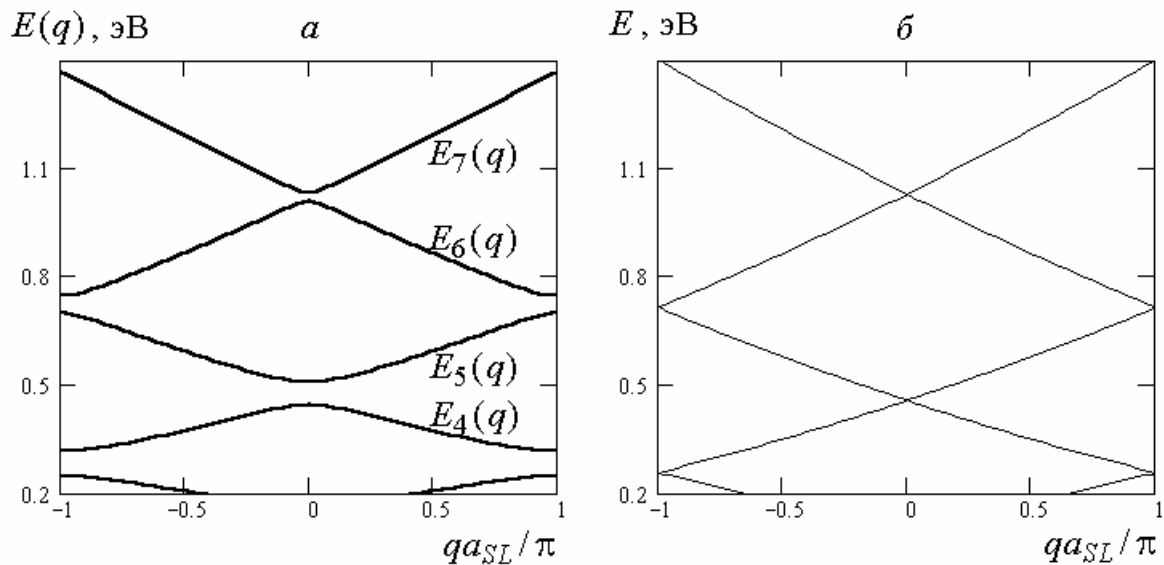


Рис. 1.27. Электронные минизоны в надбарьерной области.

а – минизоны с энергией $E > W$, найденные численным решением ДУ (1.206)–(1.207) при $K=0$. Они располагаются над первыми тремя минизонами, показанными на рис. 1.26, а, и поэтому их номера – 4, 5, 6, б – приближение для минизон в той же области энергий, полученное в модели свободных электронов. Эти кривые образованы семейством парабол $E(q + 2\pi n/a_{SL})$, где $E(q) = \hbar^2 q^2 / (2m_A)$, n – целые числа.

Естественно, в области континуума ($E > W$) возникновение минизон объясняется уже не резонансным туннелированием, а дифракцией электронной волновой функции на периодическом потенциале сверхрешетки. С ростом энергии электрона возмущающее действие потенциала сверхрешетки становится менее заметным, поэтому закон дисперсии в высоко лежащих минизонах хорошо описывается моделью свободных электронов (рис. 1.27, б).

В рассмотренной модели, с неограниченным спектром $E(k) = \hbar^2 k^2 / (2m_A)$ зоны проводимости объемного материала, количество минизон оказывается бесконечным. На практике зона проводимости имеет потолок, поэтому ближе к действительности будет картина с конечным числом минизон в зоне проводимости, подобная той, что показана на рис. 1.25, а.

1.8. ПЛОТНОСТЬ СОСТОЯНИЙ И СТАТИСТИКА ЭЛЕКТРОНОВ В СИСТЕМАХ С ПОНИЖЕННОЙ РАЗМЕРНОСТЬЮ

Как известно из курса физики полупроводников, для описания статистических свойств носителей заряда важно знать *функцию распределения* электронов f_k по их квантовым состояниям и *плотность электронных состояний* $g(E)$. В приближении идеального газа равновесное распределение электронов описывается функцией Ферми–Дирака:

$$f_k = \frac{1}{1 + \exp\left(\frac{E_k - \mu}{k_B T}\right)}, \quad (1.210)$$

где T – температура, μ – химический потенциал, k – полный набор квантовых чисел, нумерующих одноэлектронные состояния. Величина f_k дает усредненное по тепловым флуктуациям число электронов в k -ом квантовом состоянии. Функция распределения (1.210) не изменяется при переходе от объемного кристалла к структурам пониженной размерности (если остается применимым приближение идеального равновесного газа), так как ее вид обусловлен лишь тем, что электроны подчиняются принципу запрета Паули.

Функция плотности состояний $g(E)$ характеризует расположение уровней E_k на шкале энергии и поэтому она индивидуальна для каждой системы. В структурах с пониженной размерностью плотность состояний $g(E)$ приобретает ряд отличительных особенностей. Эти отличительные черты мы обсудим на конкретных модельных примерах.

В общем случае функция плотности состояний $g(E)$ для электронов определяется как производная функции $Z(E)$, представляющей собой полное число одноэлектронных состояний с энергией, меньшей заданного значения E :

$$g(E) = \frac{dZ}{dE}. \quad (1.211)$$

Другими словами, плотность состояний связывает число состояний dZ в интервале энергии от E до $E+dE$ с величиной этого интервала: $dZ=g(E)dE$. В системе конечных размеров энергетический спектр электрона E_k дискретен, поэтому число $Z(E)$ состояний с энергией E_k , меньшей заданного значения E , увеличивается с ростом E скачками. Следовательно, функция $g(E)$, как производная ступенчатой функции $Z(E)$, может быть записана в форме суммы дельта-функций $\delta(E-E_k)$:

$$g(E) \propto \sum_k \delta(E - E_k). \quad (1.212)$$

Здесь поставлен знак пропорциональности, а не равенства, так как обычно в такое определение еще включается нормирующий множитель, зависящий от размерности системы.

Если энергетический спектр E_k не имеет достаточно простого аналитического представления (например, E_k задается числовым массивом, найденным в результате численного решения дисперсионного уравнения), то плотность состояний может быть найдена только численным методом – путем прямого подсчета числа состояний в различных интервалах энергии. Однако основные черты зависимости плотности состояний от энергии проявляются уже в простых моделях, допускающих аналитический расчет.

1.8.1. Плотность состояний в трехмерном кристалле

Рассмотрим стандартную (изотропную параболическую) модель энергетического спектра в зоне проводимости объемного кристалла:

$$E_{\mathbf{k},\sigma} = \hbar^2 k^2 / (2m). \quad (1.213)$$

Здесь полный набор квантовых чисел состоит из трех проекций вектора импульса $\hbar\mathbf{k}$ и спинового квантового числа $\sigma = \uparrow, \downarrow$, по которому значения энергии двукратно вырождены. Тогда нормированная на единицу объема функция плотности состояний запишется в виде:

$$g(E) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{\mathbf{k}} \delta(E - E_{\mathbf{k}}) = \frac{2}{\Omega} \sum_{\mathbf{k}} \delta(E - E_{\mathbf{k}}) = \frac{2}{\Omega} \sum_{k_x} \sum_{k_y} \sum_{k_z} \delta(E - E_{\mathbf{k}}), \quad (1.214)$$

где Ω – объем образца, а суммирование ведется по всем возможным значениям k_x, k_y, k_z , определенным аналогично (1.21).

Если в каком-либо из направлений x, y, z дискретность энергетического спектра пренебрежимо мала, то суммирование по соответствующей проекции волнового вектора k_i в (1.214) можно заменить интегрированием:

$$\sum_{k_i} \rightarrow \frac{L_i}{2\pi} \int dk_i, \quad (1.215)$$

где L_i – размер кристалла в данном направлении. Однако для тех направлений, в которых энергетический спектр испытывает размерное квантование, суммирование в (1.214) следует сохранить, причем вести оно будет уже не по значениям волнового вектора, а по квантовым числам размерного квантования (см. примеры в разделах 1.8.2–1.8.4).

Перейдя в (1.214) к интегрированию в сферических координатах, а затем выразив величину волнового вектора через энергию ($k = \sqrt{2mE_{\mathbf{k}}} / \hbar$), получим:

$$\begin{aligned} g(E) &= 2 \int_0^\infty \frac{4\pi k^2 dk}{(2\pi)^3} \delta(E - E_{\mathbf{k}}) = \frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^3} (2m)^{3/2} \int_0^\infty E_{\mathbf{k}}^{1/2} \delta(E - E_{\mathbf{k}}) dE_{\mathbf{k}} = \\ &= \frac{4\pi}{(2\pi\hbar)^3} (2m)^{3/2} E^{1/2}. \end{aligned} \quad (1.216)$$

Таким образом, в случае трехмерного (3D) параболического спектра $g(E) \propto E^{1/2}$. График этой функции плотности состояний показан на рис. 1.28, а. Единицей измерения плотности состояний $g(E)$ в 3D-системах является $\text{эВ}^{-1}\text{см}^{-3}$.

Результат (1.216) легко получить из наглядных соображений, не прибегая к аппарату дельта-функций. Действительно, в фазовом пространстве (в \mathbf{r}, \mathbf{k} -пространстве) интервалу энергии dE соответствует сферический слой «объемом» $\Omega \cdot 4\pi k^2 dk$. Деля этот объем на фазовый объем одного квантового состояния $(2\pi)^3$, умножая результат на «спиновую двойку» и на нормировочный множитель $1/\Omega$, а затем выражая k через E , получим в качестве коэффициента при dE как раз функцию (1.216).

1.8.2. Плотность состояний в двумерной квантовой яме

Для вычисления плотности состояний 2D-системы вспомним простейшую модель – энергетический спектр (1.25) в бесконечной квантовой яме:

$$E_n(K) = \frac{\hbar^2 K^2}{2m} + \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL_z^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (1.217)$$

где $K^2 = k_x^2 + k_y^2$. Каждая ветвь этого спектра – подзона размерного квантования – двукратно вырождена по спиновому квантовому числу σ . Дальнейший вывод не зависит от явного вида дискретной компоненты энергии (1.217) и поэтому будет применим также к моделям энергетического спектра из разделов 1.2.4–1.2.5.

В двумерном случае плотность состояний целесообразно нормировать на единичную площадь $S = L_x L_y$, так что единицей измерения плотности состояний $g(E)$ в 2D-системах будет $\text{эВ}^{-1}\text{см}^{-2}$. По аналогии с предыдущим примером получим:

$$g(E) = \frac{2}{S} \sum_n \sum_{k_y} \sum_{k_x} \delta(E - E_n(K)) = 2 \sum_n \int_0^\infty \frac{2\pi K dK}{(2\pi)^2} \delta(E - E_n(K)). \quad (1.218)$$

Перейдем в (1.218) к интегрированию по непрерывной компоненте энергии (1.217). С этой целью запишем (1.217) в краткой форме

$$E_n(K) = E_K + E_n, \quad (1.219)$$

и учтем, что $K = \sqrt{2mE_K} / \hbar$. Тогда (1.218) примет вид

$$g(E) = 2 \sum_n \frac{m}{2\pi\hbar^2} \int_0^\infty dE_K \delta(E - E_n - E_K) = \sum_n \frac{m}{\pi\hbar^2} \theta(E - E_n), \quad (1.220)$$

где $\theta(x)$ – ступенчатая функция Хевисайда:

$$\theta(x) = \begin{cases} 0, & x < 0; \\ 1, & x > 0. \end{cases}$$

Таким образом, в 2D-системах плотность состояний с ростом энергии E остается постоянной при значениях энергии E , расположенных между уровнями размерного квантования E_n , и изменяется скачком на величину $m/(\pi\hbar^2)$ при достижении очередного из них (рис. 1.28, б). Этот же результат легко получить подсчетом числа квантовых состояний в фазовом пространстве 2D-системы, если площадь кольца $S \cdot 2\pi K dK$ в фазовом пространстве разделить на площадь $(2\pi)^2$ одного квантового состояния, а затем умножить на спиновую двойку и на нормировочный множитель $1/S$.

Бесконечная яма содержит бесчисленное количество подзон, однако результат (1.220) применим также к более реалистичной модели – с конечным числом параболических подзон (1.56) в яме конечной глубины W ; при этом под знак суммы в (1.220) следует подставлять параллельную массу электрона $m = m_{n\parallel}$, индивидуальную для каждой подзоны. В области энергий $E > W$ такая система становится трехмерной.

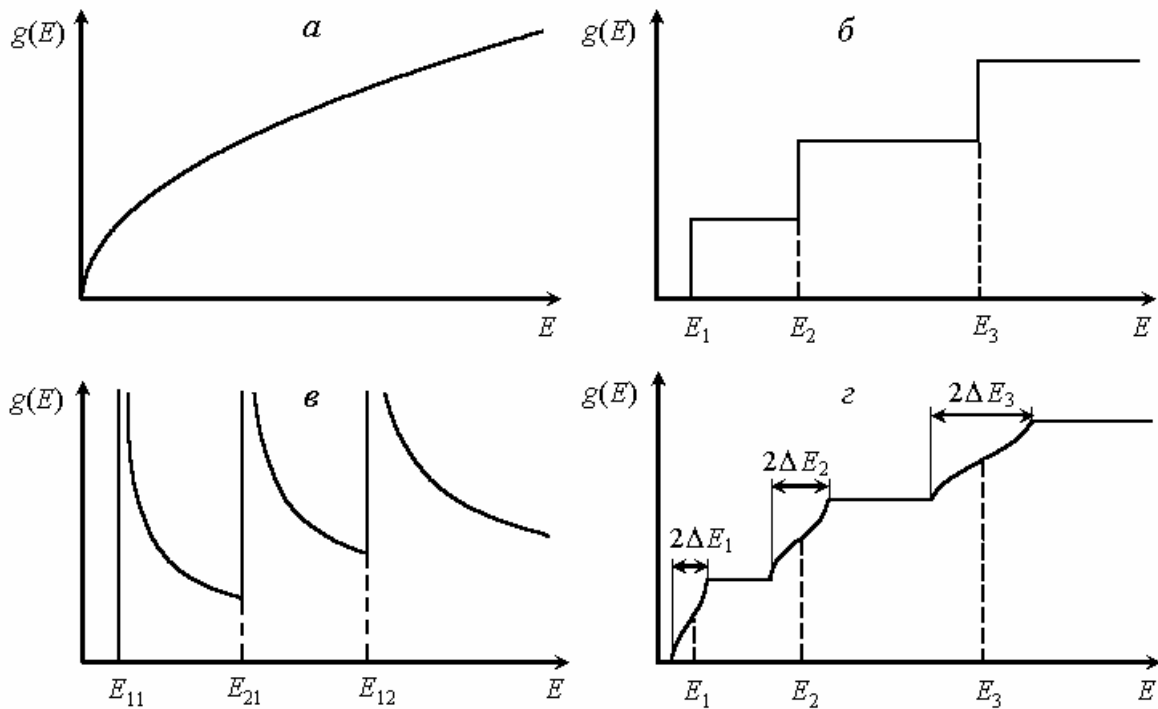


Рис. 1.28. Электронная плотность состояний различных квантово-размерных структур в сопоставлении со случаем трехмерного кристалла. *a* – для трехмерного кристалла, *б* – для квантовой ямы, *в* – для квантовой нити, *г* – для сверхрешетки.

1.8.3. Плотность состояний в одномерной нити

Пусть энергетический спектр электронов в квантовой нити определяется выражением, аналогичным (1.123):

$$E_{n_1, n_2}(k_x) = E_{n_1, n_2} + \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m} = E_{n_1, n_2} + E_{k_x}, \quad (1.221)$$

где E_{n_1, n_2} – размерно-квантованные уровни энергии для 1D-системы. Квантовыми числами являются: два номера уровней (n_1 и n_2), импульс в направлении x и спиновое квантовое число, принимающее, как обычно, два значения. Плотность состояний $g(E)$ в квантовой нити нормируют на единицу длины нити $L = L_x$, так что единицей измерения плотности состояний в 1D-системах будет $\text{эВ}^{-1}\text{см}^{-1}$. Поступая как и выше, запишем:

$$g(E) = \frac{2}{L} \sum_{n_1} \sum_{n_2} \sum_{k_x} \delta(E - E_{n_1, n_2}(k_x)) = 2 \sum_{n_1} \sum_{n_2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dk_x}{2\pi} \delta(E - E_{n_1, n_2} - E_{k_x}).$$

Учитывая, что выражение под интегралом есть четная функция переменной $k_x = \sqrt{2mE_{k_x}}/\hbar$, получим:

$$\begin{aligned} g(E) &= \frac{2}{\pi} \sum_{n_1} \sum_{n_2} \int_0^{\infty} dk_x \delta(E - E_{n_1, n_2} - E_{k_x}) = \\ &= \frac{2}{\pi} \sum_{n_1} \sum_{n_2} \frac{\sqrt{2m}}{2\hbar} \int_0^{\infty} \frac{dE_k}{\sqrt{E_k}} \delta(E - E_{n_1, n_2} - E_k) = \\ &= \sum_{n_1} \sum_{n_2} \frac{\sqrt{2m}}{\pi\hbar} \frac{\theta(E - E_{n_1, n_2})}{\sqrt{E - E_{n_1, n_2}}}. \end{aligned} \quad (1.222)$$

Таким образом, в 1D-системах плотность состояний $g(E)$ с ростом E испытывает резкий скачок при достижении края E_{n_1, n_2} очередной подзоны, а затем уменьшается по закону $1/\sqrt{E}$ в пределах этой подзоны, причем ее вклад суммируется с вкладами остальных подзон (рис. 1.28, в).

1.8.4. Плотность состояний в квантовой точке

В нульмерных системах – квантовых точках – энергетический спектр электрона является полностью дискретным (см., например, (1.125)), и поэтому график функции плотности состояний имеет вид отдельных узких пиков. Для одиночной квантовой точки с электронными уровнями E_{n_1, n_2, n_3} формула плотности состояний, измеряемой в единицах эВ⁻¹, имеет вид:

$$g(E) = \sum_{n_1} \sum_{n_2} \sum_{n_3} \delta(E - E_{n_1, n_2, n_3}). \quad (1.223)$$

На практике имеют дело с множеством квантовых точек, выращенных на поверхности или в объеме какого-либо кристалла. Если эффект туннельной связи между отдельными точками мало изменяет

картину их дискретных уровней, то функции плотности состояний одиночных точек суммируются. Результирующие пики плотности состояний следует описывать размытыми дельта-функциями; размытие возникает как из-за статистического разброса в положении уровней, так и из-за конечной их ширины, обусловленной конечным временем жизни электронного состояния в отдельной квантовой точке.

1.8.5. Плотность состояний в сверхрешетке

Вычислим плотность электронных состояний в одной из минизон периодической сверхрешетки, закон дисперсии в которой определяется выражением, подобным (1.209):

$$E_n(K, k_z) = E_n - \Delta E_n \cos(k_z a) + \frac{\hbar^2 K^2}{2m}. \quad (1.224)$$

Здесь $K^2 = k_x^2 + k_y^2$ – квадрат волнового вектора в плоскости слоев сверхрешетки, $\hbar k_z$ – квазиимпульс вдоль нормали к слоям, $a = a_{SL}$ – период сверхрешетки, ΔE_n и E_n есть, соответственно, энергетическая полуширина и центр минизоны с номером n . Плотность состояний в расчете на единицу объема запишем сразу в интегральной в форме и учтем двукратное спиновое вырождение:

$$g_n(E) = 2 \int_0^\infty \frac{2\pi K dK}{(2\pi)^2} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{dk_z}{2\pi} \delta(E - E_n(K, k_z)). \quad (1.225)$$

Переходя в этом выражении к интегрированию по $E_K = \hbar^2 K^2 / (2m)$ и $E_z = -\Delta E_n \cos(k_z a)$, преобразуем его к виду

$$g_n(E) = \frac{m}{\pi^2 \hbar^2 a} \int_{-\Delta E_n}^{\Delta E_n} \frac{dE_z}{\sqrt{\Delta E_n^2 - E_z^2}} \int_0^\infty dE_K \delta(E - E_n - E_z - E_K). \quad (1.226)$$

Второй интеграл будет равен единице, если аргумент дельта-функции имеет нуль при $E_K > 0$, то есть если $E - E_n - E_z > 0$; в противном случае результат равен нулю. Это условие может накладывать ограничения на пределы интегрирования в первом интеграле. Учитывая это обстоятельство, а также то, что допустимые значения E_z лежат в пределах от $-\Delta E_n$ до ΔE_n , имеем:

а) При $E < E_n - \Delta E_n$ аргумент дельта-функции отрицателен, поэтому выражение (1.226) равно нулю: $g_n(E) = 0$.

б) При $E_n - \Delta E < E < E_n + \Delta E_n$ интегрирование по E_z ведется от $-\Delta E_n$ до $E - E_n$, поэтому:

$$g_n(E) = \frac{m}{\pi^2 \hbar^2 a} \int_{-\Delta E_n}^{E-E_n} \frac{dE_z}{\sqrt{\Delta E_n^2 - E_z^2}} = \frac{m}{\pi^2 \hbar^2 a} \left[\arcsin \frac{E - E_n}{\Delta E_n} + \frac{\pi}{2} \right]. \quad (1.227)$$

в) При $E > E_n + \Delta E_n$ интегрирование по E_z ведется во всем допустимом интервале, так что

$$g_n(E) = \frac{m}{\pi^2 \hbar^2 a} \int_{-\Delta E_n}^{\Delta E_n} \frac{dE_z}{\sqrt{\Delta E_n^2 - E_z^2}} = \frac{m}{\pi \hbar^2 a}. \quad (1.228)$$

Для того чтобы обобщить полученный результат на случай нескольких минизон, достаточно просуммировать вклады в плотность состояний от отдельных минизон:

$$g(E) = \sum_n g_n(E). \quad (1.229)$$

Плотность состояний сверхрешетки (1.229) можно записать в виде [8]:

$$g(E) = \frac{m}{\pi \hbar^2 a} \begin{cases} \pi^{-1} \arcsin \left(\frac{E - E_n}{\Delta E_n} \right) + n - \frac{1}{2}, & E_n - \Delta E_n < E < E_n + \Delta E_n; \\ n, & E_n + \Delta E_n < E < E_{n+1} - \Delta E_{n+1}. \end{cases}$$

Подчеркнем, что это выражение представляет собой плотность состояний в образце объемом $\Omega = L_x L_y L_z$, деленную на объем Ω . Чем меньше период сверхрешетки a , тем больше размер $2\pi/a$ зоны Бриллюэна в направлении k_z и тем больше состояний она содержит – так объясняется появление множителя $1/a$ в выражениях (1.227)–(1.228).

Часто рассматривают плотность состояний (1.227)–(1.228), умноженную на период сверхрешетки a и поэтому не зависящую от a . Такой результат представляет собой плотность состояний образца объемом $\Omega = L_x L_y L_z$, деленную на $L_x L_y N$, где $N = L_z/a$ – число слоев сверхрешетки в образце. Другими словами, при такой нормировке рассматриваемая плотность состояний относится к единице площади одного слоя и поэтому ее можно сравнивать с плотностью состояний одиночной квантовой ямы. График плотности электронных состояний в сверхрешетке, отвечающий выражению (1.229), умноженному на a , показан на рис. 1.28, *з*. Видно, что на интервалах энергии вне разрешенных минизон плотность состояний сверхрешетки, как и плотность состояний в 2D-системе, оказывается постоянной: $g(E) = \text{const}$; она резко изменяется только внутри минизон. Если сверхрешетка характеризуется малой туннельной прозрачностью барьеров в слоях, то ширина ΔE_n нижних минизон мала по сравнению с энергетическими щелями между ними, и эти минизоны практически совпадают с уровнями E_n в не связанных друг с другом квантовых ямах. Видно, что в пределе с $\Delta E_n \rightarrow 0$ график плотности состояний сверхрешетки (рис. 1.28, *з*) переходит, как и должно быть, в график плотности состояний квантовой ямы (рис. 1.28, *б*).

1.8.6. Концентрация носителей заряда в квантовой яме

Знание плотности электронных состояний $g(E)$ позволяет изучать статистические свойства электронной системы. Для примера рассмотрим задачу о связи между концентрацией электронов и химическим потенциалом.

Если полный набор одноэлектронных состояний в образце описывается системой квантовых чисел k , а среднее число электронов в

каждом состоянии дается функцией распределения f_k (1.210), то сумма значений f_k по всем значениям k будет равна количеству электронов. Здесь речь идет о всех состояниях и всех электронах – относящихся не только к зоне проводимости, но и к валентной зоне, к легирующим примесным центрам, к собственным дефектам и так далее. При заданном количестве электронов в образце указанное равенство определяет химический потенциал электронной системы $\mu(T)$ как функцию температуры. Если теперь считать химический потенциал $\mu(T)$ известным, то можно найти количество электронов $n(T)$ в конкретной подсистеме электронной системы, суммируя значения f_k только по состояниям выбранной подсистемы.

Рассмотрим в качестве подсистемы одну из подзон $E_{k_x, k_y, n}$ квантовой ямы. Согласно сказанному выше, выражение для двумерной концентрации электронов n_S в двукратно вырожденной по спину подзоне следует записать в виде (в единицах см^{-2} – на единицу площади $S = L_x L_y$):

$$n_S = \frac{2}{S} \sum_{k_y} \sum_{k_x} f_{k_x, k_y}. \quad (1.230)$$

Здесь f_{k_x, k_y} зависит от k_x, k_y лишь через переменную $E_{k_x, k_y, n}$,

$$f_{k_x, k_y} = \frac{1}{1 + \exp((E_{k_x, k_y, n} - \mu)/k_B T)} \equiv f(E_{k_x, k_y, n}),$$

поэтому можно тождественно преобразовать равенство (1.230), интегрируя его правую часть по энергии E и в то же время формально снимая интегрирование с помощью дельта-функции:

$$n_S = \int_0^{\infty} dE \frac{2}{S} \sum_{k_y} \sum_{k_x} \delta(E - E_{k_x, k_y, n}) f(E).$$

Поскольку выражение

$$\frac{2}{S} \sum_{k_y} \sum_{k_x} \delta(E - E_{k_x, k_y, n}) = g_n(E) \quad (1.231)$$

представляет собой плотность состояний в подзоне с номером n , то формула для концентрации электронов в n -ой подзоне принимает вид интеграла по энергии от произведения плотности состояний и функции распределения:

$$n_S = \int_0^{\infty} dE g_n(E) f(E). \quad (1.232)$$

Таким образом, мы видим, что функция плотности состояний выступает в формулах статистики как весовой множитель в интегралах по энергии, появляющихся вместо сумм по квантовым числам.

Подставив в (1.232) выражение для двумерной плотности состояний

$$g_n(E) = \frac{m}{\pi \hbar^2} \theta(E - E_n), \quad (1.233)$$

где E_n – уровень размерного квантования, соответствующий дну n -ой подзоны, получим

$$n_S = \frac{m}{\pi \hbar^2} \int_{E_n}^{\infty} dE \frac{1}{1 + \exp((E - \mu)/k_B T)} = \frac{m k_B T}{\pi \hbar^2} \ln(1 + e^{\frac{\mu - E_n}{k_B T}}). \quad (1.234)$$

Таким образом,

$$n_S = N_c \ln(1 + e^{\frac{\mu - E_n}{k_B T}}), \quad (1.235)$$

где величина

$$N_c = \frac{m}{\pi \hbar^2} k_B T \quad (1.236)$$

представляет собой число состояний в интервале энергии $k_B T$ в расчете на единицу площади.

Если $n_S \ll N_c$, то рассматриваемый двумерный электронный газ называется невырожденным. В этом случае экспонента в (1.235) мала по сравнению с единицей. Разлагая логарифм в (1.235) в степенной ряд и удерживая только член первого порядка малости, получаем приближенную формулу:

$$n_S = N_c e^{\frac{\mu - E_n}{k_B T}} \quad \text{при} \quad \exp\left(\frac{\mu - E_n}{k_B T}\right) \ll 1. \quad (1.237)$$

Если $n_S \gg N_c$, то электронный газ называют вырожденным. При этом в (1.235) можно пренебречь единицей по сравнению с экспонентой и, таким образом, получить приближенное равенство:

$$n_S = \frac{m}{\pi \hbar^2} (\mu - E_n) \quad \text{при} \quad \exp\left(\frac{\mu - E_n}{k_B T}\right) \gg 1. \quad (1.238)$$

Оно связывает величины n_S и μ линейным соотношением.

Нередко имеют дело с квантовыми ямами, в которых двумерный электронный газ является вырожденным и заполняет только самую нижнюю подзону, E_1 (см. рис. 1.1, б). Очевидно, что в этом случае выполняется неравенство $E_1 < \mu < E_2$. Выразив в нем μ через n_S и E_1 с помощью (1.238) при $E_n = E_1$, легко найти условие, которому должна удовлетворять концентрация вырожденного электронного газа для того, чтобы имело место заполнение только первой подзоны; вместе с критерием вырождения найденное неравенство имеет следующий вид:

$$\frac{m}{\pi \hbar^2} k_B T \ll n_S < \frac{m}{\pi \hbar^2} (E_2 - E_1). \quad (1.239)$$

По аналогии с формулой (1.232) можно написать интеграл для одномерной концентрации электронов n_L (в единицах см^{-1}) в подзоне $E_{n_1, n_2} + \hbar^2 k_x^2 / (2m)$ квантовой нити. Поскольку одномерная плотность состояний не является константой (см. (1.222)), такой интеграл не вычисляется в аналитическом виде при произвольной степени вырождения; простые формулы возникают лишь в предельных случаях [8]:

$$n_L = \begin{cases} \left(\frac{2mk_B T}{\pi \hbar^2} \right)^{1/2} \exp\left(\frac{\mu - E_{n_1, n_2}}{k_B T} \right), & \text{при } \exp\left(\frac{\mu - E_{n_1, n_2}}{k_B T} \right) \ll 1, \\ \frac{2\sqrt{2m}}{\pi \hbar} (\mu - E_{n_1, n_2})^{1/2}, & \text{при } \exp\left(\frac{\mu - E_{n_1, n_2}}{k_B T} \right) \gg 1. \end{cases}$$

На практике важны также обратные соотношения, выражающие химический потенциал $\mu(T)$ через найденную из опыта температурную зависимость концентрации электронов в одной из подсистем; функция $\mu(T)$ используется затем для расчета концентрации электронов в других подсистемах.

2. РАЗМЕРНОЕ КВАНТОВАНИЕ В СТРУКТУРАХ СО СЛОЖНЫМ ЗОННЫМ СПЕКТРОМ

2.1. ОПРЕДЕЛЕНИЕ КВАНТОВЫХ СОСТОЯНИЙ ЭЛЕКТРОНА В ПЕРИОДИЧЕСКОМ ПОЛЕ КРИСТАЛЛА

2.1.1. Уравнение Шредингера для волновых функций Блоха

В реальных полупроводниковых кристаллах энергетический спектр и волновые функции стационарных состояний электронов часто имеют значительно более сложный вид, чем в «стандартной» модели с параболической зоной. Актуальные для практики полупроводниковые материалы (например, такие как полупроводниковые соединения III–V) характеризуются заметной непараболическостью зоны проводимости, сложной картиной ветвей валентной зоны и необходимостью учета спин-орбитального взаимодействия.

В одноэлектронном приближении спектр собственных значений энергии и волновые функции стационарных состояний в полупроводниковой структуре определяются уравнением Шредингера, учитывающим релятивистские поправки и спин электрона:

$$\left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + \hat{H}^{rel} \right] |\psi\rangle = E |\psi\rangle. \quad (2.1)$$

В этом уравнении $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$ – оператор импульса, m_0 – масса электрона в вакууме, $V(\mathbf{r})$ – потенциальная энергия электрона (в отсутствие внешнего магнитного поля) в электростатическом поле всех ионов и электронов, содержащихся в изучаемой системе, $|\psi\rangle$ – волновая функция в форме двухкомпонентного спинора, включающая спиновую степень свободы электрона, \hat{H}^{rel} – релятивистский вклад в гамильтониан электрона [12]:

$$\hat{H}^{rel} = -\frac{\hat{\mathbf{p}}^4}{8m_0^3c^2} + \frac{\hbar^2}{8m_0^2c^2} \Delta V + \frac{\hbar}{4m_0^2c^2} [\nabla V \times \hat{\mathbf{p}}] \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (2.2)$$

Здесь $\boldsymbol{\sigma}/2$ – оператор спина для величины спина $s = 1/2$ ($\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ – матрицы Паули), c – скорость света, \times – знак векторного произведения.

Потенциал $V(\mathbf{r})$ в (2.1) представляет собой в каждом слое гетероструктуры периодическую функцию координат, отражающую атомное строение кристаллической решетки данного слоя. Так, в случае одиночного резкого гетероперехода с плоскостью интерфейса при $z = 0$, образованного материалами А и В, функция $V(\mathbf{r})$ имеет вид:

$$V(\mathbf{r}) = \begin{cases} V_A(x, y; z), & z < 0 \\ V_B(x, y; z), & z > 0 \end{cases}, \quad (2.3)$$

где $V_A(x, y; z)$ и $V_B(x, y; z)$ – кристаллические потенциалы в слоях А и В.

Для количественного решения уравнения (2.1) с потенциалом (2.3) необходимо применять численные методы, аналогичные методам расчета зонной структуры однородных (объемных) кристаллов. Как правило, в таких расчетах потенциал $V(\mathbf{r})$ задается в модельной форме, с подгоночными параметрами, значения которых затем уточняются из сравнения теоретических результатов с экспериментальными данными об энергетическом спектре. Если это обстоятельство учесть заранее, то можно

ограничиться более простым выражением для оператора \hat{H}^{rel} . Так, второе слагаемое из (2.2) можно включить в потенциал $V(\mathbf{r})$ уравнения (2.1) и в дальнейшем не выписывать эту релятивистскую поправку явно. Несущественным оказывается также первое слагаемое в (2.2) – оно приводит к непараболичности энергетического спектра, которая, как мы далее увидим, возникает и без такого слагаемого в гамильтониане. В результате, включение \hat{H}^{rel} в гамильтониан уравнения (2.1) фактически сводится к учету только третьего слагаемого из (2.2), которое называют *спин-орбитальным взаимодействием*:

$$\hat{H}^{so} \equiv \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} [\nabla V \times \hat{\mathbf{p}}] \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (2.4)$$

В присутствии оператора \hat{H}^{so} собственные состояния $|\psi\rangle$ гамильтониана (2.1) в общем случае уже не имеют вида произведения $\psi(\mathbf{r})|\sigma\rangle$ не зависящих друг от друга орбитальной $\psi(\mathbf{r})$ и спиновой функций $|\sigma\rangle$, а представляют собой линейные комбинации этих произведений, причем, как мы увидим ниже, вырожденные (без учета \hat{H}^{so}) уровни энергии E испытывают так называемое спин-орбитальное расщепление. В ряде полупроводниковых материалов спин-орбитальное расщепление зон сравнимо по масштабу с шириной запрещенной зоны, так что член \hat{H}^{so} в уравнении Шредингера оказывается актуальным.

Состояния частиц в гетероструктурах с учетом поля кристаллической решетки естественно искать в форме линейных комбинаций волн Блоха – частных решений уравнения (2.1) с потенциалом $V(\mathbf{r})$, обладающим полной симметрией однородного кристалла. Вспомним, как определяются эти частные решения.

При наличии трансляционной симметрии кристаллического потенциала $V(\mathbf{r})$ искомые частные решения могут быть выбраны как состояния $|\psi_{\mathbf{k}}\rangle$, собственные для операторов трансляций $\hat{T}(\mathbf{R})$ на векторы \mathbf{R} решетки Браве

$$\hat{T}(\mathbf{R})|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}}|\psi_{\mathbf{k}}\rangle.$$

Действие оператора трансляции заключается в замене аргумента волновой функции \mathbf{r} на $\mathbf{r} - \mathbf{R}$. Такое решение имеет вид

$$|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |u_{\mathbf{k}}\rangle, \quad (2.5)$$

где функция $|u_{\mathbf{k}}\rangle$ не изменяется при замене \mathbf{r} на $\mathbf{r} - \mathbf{R}$, то есть она является периодической функцией координат \mathbf{r} с периодами \mathbf{R} . В этом случае выражение (2.5) называют *волной Блоха* или *блоховской волновой функцией*, а присутствующий в нем множитель $|u_{\mathbf{k}}\rangle$ – *блоховской амплитудой*.

С учетом спина электрона блоховскую амплитуду $|u_{\mathbf{k}}\rangle$ следует рассматривать как двухкомпонентный спинор, который может быть представлен линейной комбинацией двух базисных спиноров $|\sigma\rangle$. Если в качестве базисных спиноров $|\sigma\rangle$ взять спиновые состояния электрона с определенными значениями проекции спина на ось z ,

$$\begin{aligned} |\uparrow\rangle &\equiv |s_z = 1/2\rangle, \\ |\downarrow\rangle &\equiv |s_z = -1/2\rangle, \end{aligned}$$

то блоховская амплитуда в общем случае запишется в виде

$$|u_{\mathbf{k}}\rangle = u_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r}) |\uparrow\rangle + u_{\mathbf{k}\downarrow}(\mathbf{r}) |\downarrow\rangle, \quad (2.6)$$

где $u_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{r})$ и $u_{\mathbf{k}\downarrow}(\mathbf{r})$ – обычные (однокомпонентные) периодические функции координат.

Действуя оператором импульса на функцию Блоха (2.5), получим

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{p}} |\psi_{\mathbf{k}}\rangle &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{\mathbf{p}} |u_{\mathbf{k}}\rangle + \hbar\mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |u_{\mathbf{k}}\rangle, \\ \hat{\mathbf{p}}^2 |\psi_{\mathbf{k}}\rangle &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{\mathbf{p}}^2 |u_{\mathbf{k}}\rangle + 2e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hbar\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}} |u_{\mathbf{k}}\rangle + \hbar^2 k^2 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |u_{\mathbf{k}}\rangle. \end{aligned}$$

Учтем эти равенства, выполняя подстановку выражения (2.5) в уравнение Шредингера (2.1) с оператором \hat{H}^{so} в качестве \hat{H}^{rel} . Разделив левую и правую стороны получившегося равенства на $e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$, имеем следующее уравнение для блоховской амплитуды

$$\hat{H}(\mathbf{k}) |u_{\mathbf{k}}\rangle = E |u_{\mathbf{k}}\rangle, \quad (2.7)$$

где

$$\hat{H}(\mathbf{k}) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + \hat{H}^{so} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} [\nabla V \times \hbar \mathbf{k}] \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (2.8)$$

Обозначим для краткости:

$$\hat{\boldsymbol{\pi}} = \hat{\mathbf{p}} + \frac{\hbar}{4m_0 c^2} [\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V], \quad (2.9)$$

$$\hat{H}(0) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} + V(\mathbf{r}) + \hat{H}^{so}. \quad (2.10, a)$$

Тогда гамильтониан (2.8) запишется в виде:

$$\hat{H}(\mathbf{k}) = \hat{H}(0) + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \hat{\boldsymbol{\pi}} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0}. \quad (2.10, б)$$

При любом заданном волновом векторе \mathbf{k} уравнение (2.7) представляет собой задачу на собственные значения $E(\mathbf{k})$ и собственные векторы $|u_{\mathbf{k}}\rangle$ оператора $\hat{H}(\mathbf{k})$ (2.10). Пронумеруем индексом n линейно независимые решения $|u_{n\mathbf{k}}\rangle$ и соответствующие им собственные значения энергии $E_n(\mathbf{k})$. Таким образом, приходим к хорошо известному в физике твердого тела результату: энергетический спектр электрона в периодическом поле решетки складывается из множества зон $E_n(\mathbf{k})$, где n имеет смысл номера зоны.

2.1.2. Метод k_p -возмущений

В полупроводниках носители заряда заселяют состояния лишь вблизи дна зоны проводимости или у потолка валентной зоны – в окрестности некоторых экстремумов энергетического спектра. Такие экстремумы обычно находятся в симметричных точках зоны Бриллюэна; мы будем обозначать типичную точку экстремума как \mathbf{k}_0 . Характер расположения энергетических уровней $E_n(\mathbf{k}_0)$ в точке \mathbf{k}_0 и свойства решений $|u_{n\mathbf{k}_0}\rangle$ поддаются анализу методами теории симметрии [3]. Благодаря синтезу выводов теории с многочисленными экспериментальными данными в настоящее время известны значения энергетических зазоров $E_n(\mathbf{k}_0) - E_{n'}(\mathbf{k}_0)$ для большинства полупроводниковых материалов, представляющих практический интерес.

Будем далее рассматривать полупроводник с краями зон в точке $\mathbf{k}_0 = 0$ (точка Γ , центр зоны Бриллюэна). Поставим задачу следующим образом. Предположим, что в точке Γ известны энергетические уровни $E_n(0)$ и волновые функции $|u_{n0}\rangle$ (блоховские амплитуды), являющиеся решениями уравнения (2.7) при $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0 = 0$,

$$\hat{H}(0) |u_{n0}\rangle = E_n(0) |u_{n0}\rangle. \quad (2.11)$$

Задача заключается в расчете картины зон $E_n(\mathbf{k})$ и блоховских амплитуд в относительно небольшой окрестности точки \mathbf{k}_0 , поскольку при изучении свойств носителей заряда в полупроводнике можно ограничиваться знанием свойств электронных состояний лишь вблизи краев зон.

Для решения поставленной задачи естественно воспользоваться квантово-механической теорией возмущений, рассматривая в качестве малого возмущения два последних члена в правой стороне равенства (2.10, б); такой подход называют k_p -методом.

Будем искать решения $|u_{\mathbf{k}}\rangle$ уравнения (2.7) в форме разложения по полному набору состояний $|u_{n0}\rangle$, найденных для точки $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0 = 0$:

$$|u_{\mathbf{k}}\rangle = \sum_l C_l(\mathbf{k}) |u_{l0}\rangle. \quad (2.12)$$

Умножим (2.7) слева на $\langle u_{l'0}|$, выполняя при этом суммирование по спиновому индексу и интегрирование по координатам в объеме кристалла. С учетом условий ортогональности и нормировки базисных функций

$$\langle u_{l'0}|u_{l0}\rangle = \delta_{l'l} \equiv \begin{cases} 1, & l' = l, \\ 0, & l' \neq l, \end{cases} \quad (2.13)$$

получим бесконечную систему уравнений для коэффициентов $C_l(\mathbf{k})$ разложения (2.12):

$$\sum_l ((E_l(0) - E)\delta_{l'l} + V_{l'l}) C_l = 0, \quad (2.14)$$

где

$$V_{l'l} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \delta_{l'l} + \frac{\hbar}{m_0} \langle u_{l'0} | \mathbf{k} \cdot \hat{\boldsymbol{\pi}} | u_{l0} \rangle. \quad (2.15)$$

В теории $k\mathbf{p}$ -возмущений неизвестные функции $E_n(\mathbf{k})$ и $C_l(\mathbf{k})$ ищутся в форме разложения в ряд по степеням волнового вектора \mathbf{k} , отсчитываемого от точки \mathbf{k}_0 (в нашем примере – от точки $\mathbf{k} = 0$):

$$C_l(\mathbf{k}) = C_l^{(0)} + C_l^{(1)}(\mathbf{k}) + \dots, \quad (2.16)$$

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(0) + E_n^{(1)}(\mathbf{k}) + E_n^{(2)}(\mathbf{k}) + \dots. \quad (2.17)$$

В этих формулах верхний индекс указывает порядок малости членов ряда.

а) невырожденная зона. В случае невырожденного уровня $E_n(0)$ ($E_n(0) \neq E_l(0)$ при $l \neq n$) известные из курса квантовой механики формулы теории возмущений [1] ведут к следующим выражениям для первых членов в (2.16)–(2.17):

$$C_l^{(0)} = \delta_{ln}, \quad C_l^{(1)}(\mathbf{k}) = \left(\frac{\hbar}{m_0} \right) \frac{\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\pi}_{ln}}{E_n(0) - E_l(0)} \text{ при } l \neq n, \quad (2.18)$$

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(0) + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\pi}_{nn} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{l \neq n} \frac{(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\pi}_{nl})(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\pi}_{ln})}{E_n(0) - E_l(0)}, \quad (2.19)$$

где $\boldsymbol{\pi}_{ln} = \langle u_{l0} | \hat{\boldsymbol{\pi}} | u_{n0} \rangle$ – краткое обозначение матричных элементов оператора импульса (2.9). Если $\boldsymbol{\pi}_{nn} \neq 0$, то линейный по \mathbf{k} член в (2.19) будет отличен от нуля, и экстремум зоны $E_n(\mathbf{k})$ окажется смещенным из точки $\mathbf{k} = 0$, так как положение экстремума определяется уравнениями:

$$\frac{\partial E_n(\mathbf{k})}{\partial k_j} = 0, \quad j = x, y, z. \quad (2.20)$$

В рассматриваемом нами случае предполагается, что точка $\mathbf{k} = 0$ должна быть точкой экстремума невырожденной зоны $E_n(\mathbf{k})$. Значит, в нашем случае с необходимостью $\boldsymbol{\pi}_{nn} = 0$ и, следовательно, формула (2.19) описывает параболический спектр, содержащий только квадратичные по \mathbf{k} члены. Этот результат удобно представить в виде:

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(0) + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j (m^{-1})_{ij} \hbar^2 k_i k_j, \quad i, j = x, y, z, \quad (2.21)$$

где

$$(m^{-1})_{ij} = \frac{1}{m_0} \delta_{ij} + \frac{1}{m_0^2} \sum_{l \neq n} \frac{(\boldsymbol{\pi}_i)_{nl} (\boldsymbol{\pi}_j)_{ln} + (\boldsymbol{\pi}_j)_{nl} (\boldsymbol{\pi}_i)_{ln}}{E_n(0) - E_l(0)}. \quad (2.22)$$

Выражение (2.22) записано в симметризованном по индексам i, j виде, поскольку в (2.21) оно суммируется после умножения на явно симметричный тензор $k_i k_j$. Величины (2.22) называются компонентами *тензора обратной эффективной массы* электрона в окрестности экстремума зоны $E_n(\mathbf{k})$; эти величины служат константами, которые в рамках квадратичного по \mathbf{k} приближения полностью характеризуют данную невырожденную зону.

Теория симметрии показывает, что зоны $E_n(\mathbf{k})$ должны обладать точечной симметрией обратной решетки кристалла, которая, в свою

очередь, совпадает с симметрией его решетки Браве. Точка Γ зоны Бриллюэна инвариантна при всех точечных преобразованиях симметрии кристалла, так что и относящийся к ней тензор $(m^{-1})_{ij}$ должен быть инвариантным к указанным преобразованиям. В практически важном случае кубических кристаллов (кристаллические классы T, T_h, T_d, O, O_h) из этого требования следует, что в Γ -точке тензор эффективной массы пропорционален символу Кронекера δ_{ij} и, значит, он задается всего одной константой, которую можно обозначить как $1/m$:

$$(m^{-1})_{ij} = \frac{1}{m} \delta_{ij}. \quad (2.23)$$

Величину m называют эффективной массой электрона. С учетом (2.23) параболический спектр (2.21) оказывается изотропным – энергия электрона определяется лишь величиной импульса $\hbar k$, но не его направлением:

$$E_n(\mathbf{k}) = E_n(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (2.24)$$

Таким образом, применимость модели параболической зоны с изотропной эффективной массой для Γ -точки в кубических кристаллах тесно связана с отсутствием вырождения края зоны (и с возможностью пренебрегать поправками более высокого порядка по \mathbf{k}). Двукратное спиновое вырождение зон в подобных случаях не отменяет этого вывода, если матричные элементы π_{nl} для состояний с различной проекцией спина и одинаковой энергией в (2.19) равны нулю.

б) Вырожденные зоны. Если некоторые из знаменателей в выражениях (2.18)–(2.19) обращаются в нуль при отличных от нуля числителях, что имеет место в случае вырождения зонных экстремумов для различных ветвей $E_n(\mathbf{k})$, то вывод (2.24) теряет силу. Кроме того, и в отсутствие вырождения точность параболического приближения может оказаться недостаточной, если некоторые из энергетических знаменателей будут малыми по сравнению с рассматриваемым диапазоном энергии вблизи края интересующей нас зоны. В обоих случаях целесообразно

воспользоваться методами теории возмущений, развитыми для *вырожденного* или почти вырожденного энергетического спектра. В качестве существенного примера мы будем далее рассматривать картину зон, показанную на рис. 2.1.

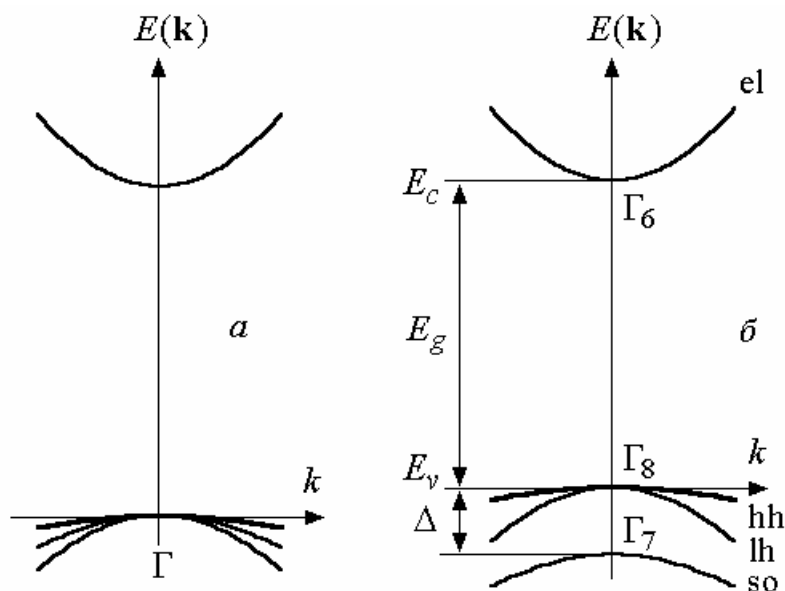


Рис. 2.1. Зонная схема полупроводников III–V.

a – картина без учета спин-орбитального расщепления зон. *б* – зонная схема с учетом спин-орбитального взаимодействия. Здесь el – зона проводимости, hh – зона тяжелых дырок (heavy holes), lh – зона легких дырок (light holes), so – отщепленная зона дырок (split-off band). Γ_6 , Γ_8 , Γ_7 – обозначения типов симметрии базисных функций $|u_{n0}\rangle$ в Γ -точке (см. [3, 2]).

Отличительная черта зонной схемы, изображенной на рис. 2.1, *a*, – присутствие четырех (без учета спина) зон, располагающихся на шкале энергии достаточно близко друг к другу и в то же время далеко по отношению к остальным ветвям энергетического спектра. Верхняя из этих четырех зон представляет собой невырожденную зону проводимости, отделенную энергетической щелью от трех ветвей валентной зоны. Последние в пренебрежении спин-орбитальным взаимодействием соприкасаются друг с другом в точке $\mathbf{k} = 0$, то есть оказываются в этой точке трехкратно вырожденными.

С учетом спина речь должна идти о вдвое большем числе зон. Теорема Крамерса в теории симметрии показывает, что в кристаллах,

группа симметрии которых содержит операцию инверсии (кристаллы с центром симметрии), каждая ветвь спектра в отсутствие внешнего магнитного поля двукратно вырождена по спину во всей зоне Бриллюэна. В кристаллах без центра симметрии крамерово вырождение в произвольных точках зоны Бриллюэна снимается; возникающее при этом спиновое расщепление зон, как показывает опыт, часто с практической точки зрения может считаться незначительным, и мы будем им всюду пренебрегать. Таким образом, говоря о вырождении зонных экстремумов (или его отсутствии), как правило, мы будем подразумевать орбитальное вырождение, дополнительное по отношению к двукратному спиновому вырождению.

При наличии вырожденных или почти вырожденных уровней $E_n(0)$ можно из бесконечной системы уравнений (2.14) получить конечную подсистему приближенных уравнений и тем самым прийти к алгебраической задаче о диагонализации некоторого *эффективного гамильтониана* – матрицы $N \times N$, где N – число учитываемых зон с близкими значениями $E_n(0)$. Поясним это подробнее. Условимся латинскими индексами a, b, \dots нумеровать те зоны, которые при $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0 = 0$ обладают близкими значениями энергии, а греческие индексы (α, β, \dots) пусть относятся ко всем остальным, «далеким» зонам. Полагая в (2.14) $l' = a$, и разбивая сумму по l на сумму по b и сумму по β , получим совокупность N уравнений:

$$(E_a(0) - E) C_a + \sum_b V_{ab} C_b + \sum_{\beta} V_{a\beta} C_{\beta} = 0, \quad a = 1, \dots, N. \quad (2.25)$$

Аналогичным образом, полагая в (2.14) $l' = \alpha$, получим бесконечную совокупность уравнений:

$$(E_{\alpha}(0) - E) C_{\alpha} + \sum_b V_{\alpha b} C_b + \sum_{\beta} V_{\alpha \beta} C_{\beta} = 0. \quad (2.26)$$

Обе совокупности уравнений, взятые вместе, образуют систему однородных уравнений для коэффициентов $C_l(\mathbf{k})$, которыми

определяются блоховские состояния в различных зонах в окрестности точки $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0 = 0$:

$$|\Psi_{\mathbf{k}}\rangle = \sum_a e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} C_a(\mathbf{k}) |u_{a0}\rangle + \sum_{\alpha} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} C_{\alpha}(\mathbf{k}) |u_{\alpha 0}\rangle. \quad (2.27)$$

Коэффициенты C_a следует отнести к величинам нулевого порядка по сравнению с коэффициентами более высокого порядка малости C_{α} , поскольку последними в (2.27) определяются вклады состояний далеких зон, убывающие обратно пропорционально величине энергетических зазоров. Пренебрегая вкладами далеких зон, можно вместо (2.27) записать приближенное равенство, содержащее конечное число слагаемых:

$$|\Psi_{\mathbf{k}}\rangle = \sum_{a=1}^N e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} C_a(\mathbf{k}) |u_{a0}\rangle. \quad (2.28)$$

Чтобы получить конечную систему уравнений для оставшихся здесь коэффициентов C_a , пренебрежем в (2.26) всеми членами под знаком суммы по β , выразим C_{α} через остальные слагаемые,

$$C_{\alpha} = (E - E_{\alpha})^{-1} \sum_b V_{\alpha b} C_b, \quad (2.29)$$

и воспользуемся этим выражением для коэффициентов C_{β} в (2.25):

$$(E_a(0) - E) C_a + \sum_b \left(V_{ab} + \sum_{\beta} \frac{V_{a\beta} V_{\beta b}}{E - E_{\beta}(0)} \right) C_b = 0. \quad (2.30)$$

В окрестности точки $\mathbf{k} = \mathbf{k}_0$ интересующие нас значения энергии E должны мало отличаться от близких по величине значений $E_a(0)$ с $a = 1, \dots, N$, но они будут существенно отличаться от уровней энергии $E_{\beta}(0)$, принадлежащих краям далеких зон. Поэтому в энергетических знаменателях выражения (2.30) можно заменить переменную E усредненной по $a = 1, \dots, N$ постоянной \bar{E} , по порядку величины равной

любому из близких уровней $E_a(0)$. Тем самым задача получения ненулевых решений C_b конечной системы однородных уравнений (2.30) приводится к задаче о собственных векторах и собственных значениях E эффективного гамильтониана – конечной матрицы $H_{ab}^{eff}(\mathbf{k})$,

$$\sum_{b=1}^N \left(H_{ab}^{eff}(\mathbf{k}) - E \delta_{ab} \right) C_b(\mathbf{k}) = 0, \quad a = 1, \dots, N, \quad (2.31)$$

где

$$H_{ab}^{eff}(\mathbf{k}) = E_a(0) \delta_{ab} + V_{ab} + \sum_{\beta} \frac{V_{a\beta} V_{\beta b}}{\bar{E} - E_{\beta}(0)}, \quad (2.32)$$

причем величины $V_{l'l}$ определяются формулой (2.15).

Если уровни $E_a(0)$ строго вырождены, то $\bar{E} = E_a(0)$, и задача (2.31)–(2.32) соответствует хорошо известной теории возмущений с вырождением [1] для определения собственных значений энергии с учетом членов второго порядка по возмущению V .

С учетом явного выражения (2.15) для матричных элементов $V_{l'l}$ имеем с точностью до членов второго порядка по \mathbf{k} :

$$H_{ab}^{eff}(\mathbf{k}) = \left(E_a(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) \delta_{ab} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\pi}_{ab} + \frac{\hbar^2}{m_0^2} \sum_{\beta} \frac{(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\pi}_{a\beta})(\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\pi}_{\beta b})}{\bar{E} - E_{\beta}(0)}. \quad (2.33)$$

О наличии недиагональных матричных элементов эффективного гамильтониана H_{ab}^{eff} принято говорить как о *взаимодействии между зонами* с номерами a и b . Члены под знаком суммы по β в (2.33) описывают не прямое взаимодействие зон a и b , возникающее за счет взаимодействия этих зон со всеми более далекими зонами. Видно, что не прямое взаимодействие зон в эффективном гамильтониане (2.33) задается набором постоянных

$$(M_{ab}^{-1})_{ij} = \frac{1}{m_0^2} \sum_{\beta} \frac{(\boldsymbol{\pi}_i)_{a\beta} (\boldsymbol{\pi}_j)_{\beta b} + (\boldsymbol{\pi}_j)_{a\beta} (\boldsymbol{\pi}_i)_{\beta b}}{\bar{E} - E_{\beta}(0)}, \quad i, j = x, y, z. \quad (2.34)$$

С этим обозначением матрица (2.33) принимает вид

$$H_{ab}^{eff}(\mathbf{k}) = \left(E_a(0) + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_0} \right) \delta_{ab} + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\pi}_{ab} + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j (M_{ab}^{-1})_{ij} \hbar^2 k_i k_j, \quad (2.35)$$

где $a, b = 1, \dots, N$.

Матрицу (2.35) называют ***kp***-гамильтонианом N -зонной модели энергетического спектра. Так, ***kp***-метод в применении к зонам, показанным на рис. 2.1, даст «восьмизонную» модель энергетического спектра – модель с четырьмя ветвями, двукратно вырожденными по спину (если пренебрегать спиновым расщеплением из-за отсутствия центра симметрии).

2.1.3. Спин-орбитальное расщепление зон

Рассмотрим подробнее пример, показанный на рис. 2.1, *a*, полагая, что он относится к кристаллам с точечной симметрией T_d . Симметрия T_d характерна для полупроводниковых соединений III–V, обладающих структурой цинковой обманки. Для этого случая известно, что орбитальная часть блоховской функции на краю зоны проводимости в точке Γ инвариантна к преобразованиям координат из группы симметрии кристалла; это свойство блоховской функции в некотором смысле аналогично инвариантности по отношению к произвольным поворотам S -состояний – состояний с равным нулю орбитальным моментом импульса l . Три орбитальные блоховские функции, принадлежащие трехкратно вырожденному (шестикратно с учетом спина) потолку валентной зоны в точке Γ преобразуются под действием операций из точечной группы симметрии кристалла как компоненты x, y, z радиус-вектора, что аналогично поведению триплета P -состояний – состояний с орбитальным моментом $l = 1$.

Группа T_d состоит из преобразований симметрии правильного тетраэдра. Она включает три взаимно перпендикулярные оси симметрии второго порядка (C_2), параллельные направлениям $[100]$, $[010]$, $[001]$ кубического кристалла, оси симметрии третьего порядка (C_3), параллельные направлениям типа $[111]$, а также плоскости симметрии типа (110) . Здесь и далее мы считаем, что координатные оси x , y , z выбираются вдоль направлений $[100]$, $[010]$, $[001]$.

Гамильтониан (2.10, *a*) без последнего (релятивистского) слагаемого не изменяет спиновых состояний, поскольку действует только на орбитальную часть волновой функции. Поэтому базисные функции $|u_{n0}\rangle$, являющиеся решением уравнения (2.11) без учета спин-орбитального взаимодействия, можно выбрать в форме произведений не связанных друг с другом орбитальных и спиновых сомножителей:

$$|u_{10}\rangle = S(\mathbf{r})|\uparrow\rangle, \quad |u_{20}\rangle = S(\mathbf{r})|\downarrow\rangle, \quad (2.36)$$

$$\left. \begin{aligned} |u_{30}\rangle &= X(\mathbf{r})|\uparrow\rangle, & |u_{40}\rangle &= X(\mathbf{r})|\downarrow\rangle, \\ |u_{50}\rangle &= Y(\mathbf{r})|\uparrow\rangle, & |u_{60}\rangle &= Y(\mathbf{r})|\downarrow\rangle, \\ |u_{70}\rangle &= Z(\mathbf{r})|\uparrow\rangle, & |u_{80}\rangle &= Z(\mathbf{r})|\downarrow\rangle. \end{aligned} \right\} \quad (2.37)$$

Здесь S – инвариантная к преобразованиям симметрии кристалла четная функция координат, X, Y, Z – триплет нечетных функций, преобразующихся под действием точечных операций симметрии кристалла подобно компонентам радиус-вектора x , y , z . Мы будем считать, что эти четыре функции вещественны.

Вычислим в базисе (2.36)–(2.37) матричные элементы оператора спин-орбитального взаимодействия

$$\hat{H}^{so} = \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} = \hat{L}_x \hat{\sigma}_x + \hat{L}_y \hat{\sigma}_y + \hat{L}_z \hat{\sigma}_z, \quad (2.38)$$

где

$$\hat{\mathbf{L}} = \frac{\hbar}{4m_0^2 c^2} [\nabla V \times (-i\hbar\nabla)]. \quad (2.39)$$

Оператор $\hat{\mathbf{L}}$ (2.39) действует только на орбитальную часть состояний, тогда как матрицы Паули $\boldsymbol{\sigma}$ действуют лишь на спинорные сомножители:

$$\left. \begin{aligned} \hat{\sigma}_x |\uparrow\rangle &= |\downarrow\rangle, & \hat{\sigma}_y |\uparrow\rangle &= i|\downarrow\rangle, & \hat{\sigma}_z |\uparrow\rangle &= |\uparrow\rangle, \\ \hat{\sigma}_x |\downarrow\rangle &= |\uparrow\rangle, & \hat{\sigma}_y |\downarrow\rangle &= -i|\uparrow\rangle, & \hat{\sigma}_z |\downarrow\rangle &= -|\downarrow\rangle. \end{aligned} \right\} \quad (2.40)$$

Поэтому, например,

$$\hat{H}^{so} |u_{10}\rangle = (\hat{L}_x S) |\downarrow\rangle + (\hat{L}_y S) i |\downarrow\rangle + (\hat{L}_z S) |\uparrow\rangle. \quad (2.41)$$

Умножив (2.41) на $\langle u_{10} |$, интегрируя по объему кристалла и принимая во внимание условие ортогональности спиноров,

$$\langle \sigma' | \sigma \rangle = \delta_{\sigma'\sigma}, \quad \sigma, \sigma' = \uparrow, \downarrow,$$

получим

$$\langle u_{10} | \hat{H}^{so} | u_{10} \rangle = \langle S \hat{L}_z S \rangle, \quad (2.42)$$

где

$$\langle S \hat{L}_z S \rangle \equiv \frac{-i\hbar^2}{4m_0^2 c^2} \int d^3\mathbf{r} S \left(\frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial S}{\partial y} - \frac{\partial V}{\partial y} \frac{\partial S}{\partial x} \right). \quad (2.43)$$

Результат (2.42) справедлив и для матричного элемента $\langle u_{20} | \hat{H}^{so} | u_{20} \rangle$.

Тем же путем мы найдем, что

$$\langle u_{20} | \hat{H}^{so} | u_{10} \rangle = \langle S \hat{L}_x S \rangle + i \langle S \hat{L}_y S \rangle. \quad (2.44)$$

Заметим теперь, что по отношению к точечным преобразованиям симметрии интегралы $\langle S \hat{L}_j S \rangle$ (где $j = x, y, z$) представляют собой компоненты некоторого вектора (точнее говоря, псевдовектора) и в то же время они должны иметь смысл инвариантных параметров, так как они входят в инвариантную к преобразованиям симметрии матрицу

гамильтониана. Группа T_d содержит различные оси симметрии, а поскольку не существует отличного от нуля вектора, инвариантного к поворотам вокруг не совпадающих по направлению осей, то интегралы (2.42)–(2.44) с необходимостью равны нулю. Это рассуждение служит здесь примером применения так называемого метода *прямой проверки*, позволяющего учитывать влияние симметрии кристалла на структуру набора инвариантных параметров, характеризующих кристалл.

Такой же результат следует из рассмотрения подынтегрального выражения в (2.43). Действительно, совершив замену переменных (что не должно изменить значения интеграла), отвечающую повороту координатных осей на угол 180° вокруг направления $[100]$, то есть – вокруг оси x :

$$x' = x, \quad y' = -y, \quad z' = -z. \quad (2.45)$$

Блоховская амплитуда $S(\mathbf{r})$ и потенциал $V(\mathbf{r})$ в кристалле с симметрией T_d инвариантны относительно такого C_2 -преобразования. Но так как подынтегральное выражение содержит символы дифференцирования по координатам x и y , оно при замене переменных (2.45) изменяет знак (является нечетной функцией относительно данного преобразования), и поэтому интеграл (2.43) должен быть равен нулю.

Матричные элементы оператора \hat{H}^{so} между состояниями зоны проводимости (2.36) и валентной зоны (2.37) включают интегралы

$$\langle S \hat{L}_i X_j \rangle \equiv A_{ij}, \quad i, j = x, y, z, \quad (2.46)$$

где X_j означает $X(\mathbf{r})$, $Y(\mathbf{r})$ или $Z(\mathbf{r})$. Поскольку \hat{L}_i преобразуются как компоненты псевдовектора, а X_j – как компоненты вектора, то величины (2.46) обладают поведением псевдотензора второго ранга. Это означает, что под действием поворотов величины A_{ij} преобразуются аналогично произведениям $x_i x_j$ компонент вектора, а при отражении они приобретают дополнительный множитель (-1) :

$$A_{ij} \sim (-1)^n x_i x_j, \quad (2.47)$$

где n – число отражений, выполненных в процессе преобразования координат; символ \sim здесь заменяет слова «преобразуется как».

Для определения независимых констант среди A_{ij} снова воспользуемся методом прямой проверки. Из (2.47) следует, что при повороте (2.45) величины A_{xy} , A_{yx} , A_{xz} , A_{zx} изменяют знак. Так как, с другой стороны, эти величины являются параметрами кристалла, инвариантными к преобразованиям симметрии, они равны нулю. Подобным же образом легко проверить, что наличие осей симметрии C_2 , параллельных координатным осям y , z приводит к обращению в нуль всех остальных недиагональных компонент A_{ij} , а следствием симметрии относительно поворота C_3 вокруг оси, параллельной направлению $[111]$, является взаимное равенство диагональных компонент: $A_{xx} = A_{yy} = A_{zz}$. Однако группа T_d включает наряду с указанными поворотами C_2 и C_3 еще и отражение в плоскости (110):

$$x' = y, \quad y' = x, \quad z' = z. \quad (2.48)$$

С учетом закона преобразования (2.47) и условия инвариантности A_{ij} отсюда следует, в частности, что $A_{xx} = -A_{yy}$. Теперь осталось заметить, что найденные соотношения между A_{ij} могут одновременно удовлетворяться только в том случае, когда все $A_{ij} = 0$.

Таким образом, все связанные с зоной проводимости матричные элементы оператора спин-орбитального взаимодействия равны нулю.

Рассмотрим теперь матричные элементы оператора \hat{H}^{so} для состояний валентной зоны. Эти матричные элементы определяются интегралами

$$\langle X_i \hat{L}_j X_k \rangle \equiv B_{ijk}, \quad i, j, k = x, y, z, \quad (2.49)$$

обладающими свойствами псевдотензора третьего ранга:

$$B_{ijk} \sim (-1)^n x_i x_j x_k. \quad (2.50)$$

Пользуясь, как и выше, методом прямой проверки, легко убедиться, что в случае симметрии T_d отличные от нуля компоненты псевдотензора (2.50) существуют и определяются для каждого материала всего одной константой:

$$\left. \begin{aligned} B_{xyz} = B_{yzx} = B_{zxy} &\equiv b \\ B_{yxz} = B_{xzy} = B_{zyx} &\equiv -b, \end{aligned} \right\} \quad (2.51)$$

где

$$b = \langle X \hat{L}_y Z \rangle = \frac{-i\hbar^2}{4m_0^2 c^2} \int d^3\mathbf{r} X \left(\frac{\partial V}{\partial z} \frac{\partial Z}{\partial x} - \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial Z}{\partial z} \right). \quad (2.52)$$

Структура (2.51) характерна также для псевдотензоров третьего ранга, описывающих свойства кристаллов с симметрией O , O_h и, кроме того, – свойства изотропных сред. Так как функции V, S, X, Y, Z вещественны, постоянная (2.52) – мнимая величина; вместо нее можно ввести вещественную константу a :

$$b = ia. \quad (2.53)$$

В итоге, относящаяся к валентной зоне часть матрицы \hat{H}^{so} принимает вид:

	$X \uparrow\rangle$	$X \downarrow\rangle$	$Y \uparrow\rangle$	$Y \downarrow\rangle$	$Z \uparrow\rangle$	$Z \downarrow\rangle$
$\langle\uparrow X$	0	0	$-ia$	0	0	a
$\langle\downarrow X$	0	0	0	ia	$-a$	0
$\langle\uparrow Y$	ia	0	0	0	0	$-ia$
$\langle\downarrow Y$	0	$-ia$	0	0	$-ia$	0
$\langle\uparrow Z$	0	$-a$	0	ia	0	0
$\langle\downarrow Z$	a	0	ia	0	0	0

(2.54)

Найдем собственные значения этой матрицы; они будут иметь смысл обусловленных спин-орбитальным взаимодействием поправок к шестикратно вырожденному (с учетом спина) уровню E_v потолка валентной зоны. Принадлежащие этим собственным значениям собственные состояния в дальнейшем послужат новым базисом – обеспечивающим диагонализацию матрицы \hat{H}^{so} .

Уравнение для собственных значений λ матрицы (2.54),

$$\det(\hat{H}^{so} - \lambda \hat{1}) = 0,$$

сводится к алгебраическому уравнению шестой степени:

$$(a - \lambda)^2 (2a^2 - \lambda(\lambda + a))^2 = 0.$$

Оно имеет четырехкратный корень

$$\lambda_{1,2,3,4} = a, \quad (2.55)$$

а также двукратный корень:

$$\lambda_{5,6} = -2a. \quad (2.56)$$

Таким образом, спин-орбитальное взаимодействие частично снимает вырождение ветвей валентной зоны в точке Γ – между двумя из шести вырожденных уровней и остальными четырьмя уровнями образуется энергетическая щель Δ :

$$\Delta = 3a.$$

Экспериментальные данные позволяют заключить, что величина a положительна, то есть вверх по шкале энергии отщепляются четыре состояния, а вниз – два, как это и было показано на рис. 2.1, б.

Собственные состояния $|u\rangle$ матрицы (2.54) ищем в виде разложения по исходному базису (2.37) с коэффициентами c_1, \dots, c_6 :

$$|u\rangle = c_1 X|\uparrow\rangle + c_2 X|\downarrow\rangle + c_3 Y|\uparrow\rangle + c_4 Y|\downarrow\rangle + c_5 Z|\uparrow\rangle + c_6 Z|\downarrow\rangle. \quad (2.57)$$

Эти коэффициенты следует подчинить системе шести уравнений

$$\sum_{n=1}^6 \left(\hat{H}_{n'n}^{so} - \lambda \delta_{n'n} \right) c_n = 0. \quad (2.58)$$

При $\lambda = \lambda_{1,2,3,4} = a$ указанная система сводится к двум независимым уравнениям,

$$c_1 + ic_3 - c_6 = 0, \quad c_2 - ic_4 + c_5 = 0, \quad (2.59)$$

а при $\lambda = \lambda_{5,6} = -2a$ система (2.58) эквивалентна следующим четырем уравнениям:

$$c_1 + c_6 = 0, \quad c_2 - c_5 = 0, \quad ic_3 - c_1 = 0, \quad ic_4 + c_2 = 0. \quad (2.60)$$

Два уравнения (2.59) выделяют в 6-мерном пространстве состояний $|u\rangle$ подпространство с размерностью $6-2=4$, а уравнениями (2.60) определяется ортогональное к нему 2-мерное подпространство. Таким образом, новые базисные состояния $|u_{n0}\rangle$ можно выбрать бесконечным числом способов – достаточно в каждом из двух упомянутых подпространств произвольно задать ортонормированный базис.

Для более определенного выбора базиса следует потребовать, чтобы искомые состояния (2.57) были собственными не только для \hat{H}^{so} , но и для какой-либо матрицы, коммутирующей с \hat{H}^{so} . Одной из таких матриц является матрица

$$\hat{J}_z = \frac{1}{a} \hat{L}_z + \frac{1}{2} \hat{\sigma}_z, \quad (2.61)$$

имеющая вид:

	$X \uparrow\rangle$	$X \downarrow\rangle$	$Y \uparrow\rangle$	$Y \downarrow\rangle$	$Z \uparrow\rangle$	$Z \downarrow\rangle$
$\langle\uparrow X$	1/2	0	$-i$	0	0	0
$\langle\downarrow X$	0	-1/2	0	$-i$	0	0
$\langle\uparrow Y$	i	0	1/2	0	0	0
$\langle\downarrow Y$	0	i	0	-1/2	0	0
$\langle\uparrow Z$	0	0	0	0	1/2	0
$\langle\downarrow Z$	0	0	0	0	0	-1/2

Этот факт обусловлен тем, что оператор $\hat{\mathbf{L}}$ в (2.38)–(2.39) аналогичен обычному квантово-механическому оператору орбитального момента $\hat{\mathbf{I}} = \mathbf{r} \times (-i\nabla)$. Действительно, матрицы $a^{-1}\hat{L}_x$, $a^{-1}\hat{L}_y$, $a^{-1}\hat{L}_z$ в трехмерном базисе функций X, Y, Z совпадают с хорошо известными из упражнений по квантовой механике матрицами проекций орбитального момента $\hat{l}_x, \hat{l}_y, \hat{l}_z$, найденными в базисе P -функций, преобразующихся при поворотах как компоненты радиус-вектора x, y, z ,

$$a^{-1}\hat{L}_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad a^{-1}\hat{L}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad a^{-1}\hat{L}_z = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.62)$$

Триплет P -функций соответствует значению орбитального момента $l = 1$. Следовательно, задача о собственных векторах оператора спин-орбитального взаимодействия (2.54) математически аналогична задаче о собственных состояниях оператора $\hat{\mathbf{I}} \cdot \hat{\mathbf{s}}$ для электрона с орбитальным моментом $l = 1$ и спином $s = 1/2$. Из курса квантовой механики мы знаем, что в качестве собственных векторов оператора $\hat{\mathbf{I}} \cdot \hat{\mathbf{s}}$ можно выбрать состояния $|J, J_z\rangle$, обладающие определенными значениями суммарного момента J и его проекции J_z . В нашем случае эти состояния образуют два мультиплета, так как согласно квантово-механическому правилу

сложения углового момента при $l=1$ и $s=1/2$ допустимыми значениями полного момента $J=l+s, l+s-1, \dots, |l-s|$ будут два числа, $3/2$ и $1/2$:

$$\left. \begin{array}{l} J = 3/2, \text{ кватрет: } J_z = 3/2, 1/2, -1/2, -3/2, \\ J = 1/2, \text{ дублет: } J_z = 1/2, -1/2. \end{array} \right\} \quad (2.63)$$

Поскольку кристаллический потенциал не обладает сферической симметрией, момент импульса частиц в кристаллической решетке, строго говоря, не является сохраняющейся величиной. Тем не менее, отмеченная выше аналогия позволяет описывать картину спин-орбитального расщепления зон в терминах базисных состояний $|u\rangle = |J, J_z\rangle$, характеризующихся эффективным полным моментом J и его проекцией J_z . Найдем эти состояния.

Из системы уравнений

$$\sum_{n=1}^6 \left((\hat{J}_z)_{n'n} - J_z \delta_{n'n} \right) c_n = 0, \quad n' = 1, \dots, 6, \quad (2.64)$$

которой определяются собственные векторы матрицы (2.61), при $J_z = -3/2$ следуют соотношения

$$c_1 = c_3 = c_5 = c_6 = 0, \quad c_4 = -ic_2.$$

При этом уравнения (2.59) для 4-мерной части базиса $|u\rangle = |J, J_z\rangle$ автоматически удовлетворяются. Видно, что с учетом условия нормировки искомого состояния на единицу,

$$\sum_{n=1}^6 |c_n|^2 = 1, \quad (2.65)$$

можно положить $c_2 = 1/\sqrt{2}$. Тогда $c_4 = -i/\sqrt{2}$, и одно из четырех состояний $|J, J_z\rangle$ кватрета с $J = 3/2$ оказывается найденным:

$$|3/2, -3/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} X|\downarrow\rangle - \frac{i}{\sqrt{2}} Y|\downarrow\rangle.$$

При $J_z = -1/2$ система (2.64) приводит к уравнениям

$$c_2 = c_4 = c_5 = 0, \quad c_3 = -ic_1.$$

Для квартета с $J = 3/2$ эти соотношения надо дополнить уравнениями (2.59), а для дублета с $J = 1/2$ – уравнениями (2.60). Решив обе системы уравнений и выполнив нормировку согласно (2.65), получим:

$$\begin{aligned} |3/2, -1/2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{6}} X|\uparrow\rangle - \frac{i}{\sqrt{6}} Y|\uparrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} Z|\downarrow\rangle, \\ |1/2, -1/2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} X|\uparrow\rangle - \frac{i}{\sqrt{3}} Y|\uparrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}} Z|\downarrow\rangle. \end{aligned}$$

Аналогичным путем вычисляются и остальные состояния в мультиплетах (2.63). Фазовые множители базисных состояний могут быть произвольными. Приведем полный список найденных таким образом базисных состояний:

$$\begin{aligned} &\left\{ \begin{aligned} |u_{10}\rangle &= |1/2, 1/2\rangle = S|\uparrow\rangle \\ |u_{20}\rangle &= |1/2, -1/2\rangle = S|\downarrow\rangle \end{aligned} \right\}, & \Gamma_6, & E_c; \\ &\left\{ \begin{aligned} |u_{30}\rangle &= |3/2, 3/2\rangle = \frac{-1}{\sqrt{2}}(X + iY)|\uparrow\rangle \\ |u_{40}\rangle &= |3/2, 1/2\rangle = \frac{-1}{\sqrt{6}}(X + iY)|\downarrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}Z|\uparrow\rangle \\ |u_{50}\rangle &= |3/2, -1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}}(X - iY)|\uparrow\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}}Z|\downarrow\rangle \\ |u_{60}\rangle &= |3/2, -3/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(X - iY)|\downarrow\rangle \end{aligned} \right\}, & \Gamma_8, & E_v = E_c - E_g; \\ &\left\{ \begin{aligned} |u_{70}\rangle &= |1/2, 1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(X + iY)|\downarrow\rangle + \frac{1}{\sqrt{3}}Z|\uparrow\rangle \\ |u_{80}\rangle &= |1/2, -1/2\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(X - iY)|\uparrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{3}}Z|\downarrow\rangle \end{aligned} \right\}, & \Gamma_7, & E_c - E_g - \Delta. \end{aligned} \tag{2.66}$$

Эти состояния принадлежат краям зон $E_n(0)$ в точке Γ , определенным уже с учетом спин-орбитального расщепления Δ .

2.1.4. Гамильтониан модели Кейна

Пользуясь базисом (2.66) приступим к вычислению элементов матрицы эффективного гамильтониана (2.35). Эти матричные элементы, в свою очередь, определяются матричными элементами оператора импульса $\hat{\pi}$ (2.9):

$$\begin{aligned} (\pi_j)_{ab} &= \langle u_{a0} | (-i\hbar\nabla + \frac{\hbar}{4m_0c^2} [\boldsymbol{\sigma} \times \nabla V])_j | u_{b0} \rangle = \\ &= -i\hbar \langle u_{a0} | \frac{\partial}{\partial x_j} | u_{b0} \rangle + \frac{\hbar}{4m_0c^2} \sum_i \sum_k e_{jik} \langle u_{a0} | \hat{\sigma}_i \frac{\partial V}{\partial x_k} | u_{b0} \rangle, \end{aligned} \quad (2.67)$$

где e_{jik} – единичный антисимметричный псевдотензор:

$$\begin{cases} e_{xyz} = e_{yzx} = e_{zxy} = 1, \\ e_{yxz} = e_{xzy} = e_{zyx} = -1, \end{cases} \quad \text{остальные } e_{jik} = 0. \quad (2.68)$$

Следует отметить, что в теории симметрии для построения kp -гамильтонианов разработан мощный метод, называемый методом инвариантов [3]. Мы пользуемся более наглядным, хотя громоздким и не вполне исчерпывающим анализом матричных элементов на основе «метода прямой проверки».

Слагаемые в (2.67), пропорциональные $1/c^2$, имеют релятивистскую природу и, как оказывается, привносят относительно малые изменения в картину энергетических зон материалов III–V. Роль этих членов мы рассмотрим в дальнейшем, а пока полностью ими пренебрежем, полагая

$$(\pi_j)_{ab} \approx (p_j)_{ab} = -i\hbar \langle u_{a0} | \frac{\partial}{\partial x_j} | u_{b0} \rangle, \quad j = x, y, z. \quad (2.69)$$

Для вычисления матричных элементов оператора импульса (2.69) важно, что дифференцирование действует только на орбитальную часть состояний $|u_{b0}\rangle$, причем базисные спиноры $|\uparrow\rangle$, $|\downarrow\rangle$ взаимно ортогональны и нормированы на единицу. В силу этой ортогональности некоторые матричные элементы будут с очевидностью равны нулю, например:

$$\langle u_{10} | \frac{\partial}{\partial x_j} | u_{60} \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left\langle S \left(\frac{\partial X}{\partial x_j} - i \frac{\partial Y}{\partial x_j} \right) \right\rangle \langle \uparrow | \downarrow \rangle = 0.$$

Кроме того, многие матричные элементы обращаются в нуль вследствие нечетности входящих в них подынтегральных выражений. Так, матричные элементы оператора импульса для состояний (2.66) с номерами $a, b = 3, \dots, 8$ включают интегралы

$$\left\langle X_i \frac{\partial X_k}{\partial x_j} \right\rangle = 0, \quad i, j, k = x, y, z,$$

обращающиеся в нуль в силу того, что подынтегральные функции $X_i \partial X_k / \partial x_j$ изменяют свой знак при изменении знака одной из переменных интегрирования x, y, z ; это обусловлено наличием определенной четности у функций X, Y, Z (они нечетны). Матричные элементы с номерами $a, b = 1, 2$ также равны нулю; действительно, S – четная функция, поэтому $S \partial S / \partial x_j$ – нечетная функция аргумента x_j , так что

$$\left\langle S \frac{\partial S}{\partial x_j} \right\rangle = 0.$$

Четные подынтегральные выражения встречаются при вычислении только тех матричных элементов оператора импульса, которые связывают состояния 1, 2 с состояниями 3, ..., 8. Соответствующие интегралы обладают свойствами тензора второго ранга:

$$\left\langle S \frac{\partial X_i}{\partial x_j} \right\rangle \sim x_i x_j.$$

Наличие трех осей симметрии второго порядка (C_2), параллельных координатным осям x, y, z , приводит к обращению в нуль недиагональных компонент любого тензора второго ранга, инвариантного к преобразованиям симметрии. Диагональные же компоненты в общем случае отличны от нуля и вследствие симметрии относительно поворотов C_3 вокруг направлений типа (111) равны друг другу. Этот результат справедлив не только в случае симметрии T_d , но и в остальных кристаллических классах кубической сингонии. Более того, такой же вид имеют тензоры второго ранга, характеризующие свойства изотропных сред: все они пропорциональны δ_{ij} .

Таким образом, отличные от нуля матричные элементы импульса определяются величиной

$$\langle S | \hat{p}_x | X \rangle = \langle S | \hat{p}_y | Y \rangle = \langle S | \hat{p}_z | Z \rangle. \quad (2.70)$$

В силу эрмитовости операторов $\hat{p}_j = -i\hbar \nabla_j$ выполняется равенство

$$\langle X | \hat{p}_x | S \rangle = \langle S | \hat{p}_x | X \rangle^*. \quad (2.71)$$

Величина (2.71) является мнимой (поскольку X_j и S – вещественные функции), так что

$$\langle X | \hat{p}_x | S \rangle = -\langle S | \hat{p}_x | X \rangle.$$

Поэтому интегралы (2.70) и комплексно сопряженные интегралы типа (2.71) можно выразить всего через одну вещественную константу P ,

$$P \equiv \frac{i\hbar}{m_0} \langle S | \hat{p}_x | X \rangle = \frac{\hbar^2}{m_0} \left\langle S \frac{\partial X}{\partial x} \right\rangle, \quad (2.72)$$

которая в приближении (2.69) задает линейные по \mathbf{k} элементы $(\hbar/m_0)\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_{ab}$ эффективного гамильтониана (2.35).

Квадратичные по \mathbf{k} вклады в эффективный гамильтониан, помимо члена, пропорционального δ_{ab}/m_0 , связаны с набором постоянных $(M_{ab}^{-1})_{ij}$, описываемых формулой (2.34). Необходимое число таких постоянных можно установить из соображений симметрии, прежде определив их трансформационные свойства [3]. С этой целью разобьем сумму по β в (2.34) на отдельные вклады, соответствующие кратности вырождения каждого из уровней энергии $E_\beta(0)$, и рассмотрим какой-либо один, типичный вклад. Так, вклад g -кратно вырожденного уровня $E_\beta(0)$ в (2.34) можно записать с учетом (2.69) в виде

$$\frac{m_0^{-2}}{\bar{E} - E_\beta(0)} \left(\sum_{\gamma=1}^g \langle u_{a0} | \hat{p}_i | u_\gamma \rangle \langle u_\gamma | \hat{p}_j | u_{b0} \rangle + \sum_{\gamma=1}^g \langle u_{a0} | \hat{p}_j | u_\gamma \rangle \langle u_\gamma | \hat{p}_i | u_{b0} \rangle \right), \quad (2.73)$$

где $|u_\gamma\rangle$ – те функции $|u_{\beta 0}\rangle$, которые принадлежат рассматриваемому вырожденному уровню. При любом преобразовании симметрии функции $|u_\gamma\rangle$ ведут себя как члены одного мультиплета, то есть они линейно преобразуются друг через друга, не затрагивая собственных функций, принадлежащих другим уровням энергии; это обусловлено тем, что преобразование симметрии оставляет неизменной энергию состояния. Отметив штрихом величины, возникающие в результате какого-либо преобразования симметрии \hat{R} , имеем:

$$|u'_\gamma\rangle = \hat{R} |u_\gamma\rangle = \sum_{\eta=1}^g R_{\eta\gamma} |u_\eta\rangle,$$

$$\langle u'_\gamma | = \sum_{\nu=1}^g R_{\nu\gamma}^* \langle u_\nu |.$$

Поскольку $R_{\eta\gamma}$ – унитарная матрица, то

$$R_{\nu\gamma}^* = (R^+)_{\gamma\nu} = (R^{-1})_{\gamma\nu}.$$

Поэтому:

$$\sum_{\gamma=1}^g |u'_\gamma\rangle\langle u'_\gamma| = \sum_{\eta=1}^g \sum_{\nu=1}^g |u_\eta\rangle\langle u_\nu| \sum_{\gamma=1}^g R_{\eta\gamma} (R^{-1})_{\gamma\nu} = \sum_{\eta=1}^g |u_\eta\rangle\langle u_\eta|. \quad (2.74)$$

Это равенство показывает, что закон преобразования функций $|u_\gamma\rangle$ не оказывает влияния на трансформационные свойства выражения (2.73), так как

$$\sum_{\gamma=1}^g \langle u'_{a0} | \hat{p}'_i | u'_\gamma \rangle \langle u'_\gamma | \hat{p}'_j | u'_{b0} \rangle = \sum_{\gamma=1}^g \langle u'_{a0} | \hat{p}'_i | u_\gamma \rangle \langle u_\gamma | \hat{p}'_j | u'_{b0} \rangle. \quad (2.75)$$

Такой вывод справедлив для вкладов от всех уровней энергии в (2.34), включая вклады невырожденных уровней. Следовательно, трансформационные свойства всей суммы в (2.34) определяются только свойствами базисных функций $|u_{a0}\rangle$, $|u_{b0}\rangle$ и векторным характером оператора импульса, так что

$$(M_{ab}^{-1})_{ij} \sim \langle u_{a0} | \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial x_i} \right) | u_{b0} \rangle. \quad (2.76)$$

При рассмотрении матричных элементов (2.76), как и выше, мы будем учитывать ортогональность базисных спиноров, четность подынтегральных функций, и применять метод прямой проверки. Заметим, например, что при $a = b = 1, 2$ величины (2.76) образуют тензор второго ранга, который, как уже пояснялось выше, в кристалле кубической сингонии определяется единственной константой:

$$(M_{11}^{-1})_{ij} = (M_{22}^{-1})_{ij} \equiv \frac{1}{M} \delta_{ij}.$$

Вводя новую постоянную,

$$\frac{1}{m_c} \equiv \frac{1}{m_0} + \frac{1}{M},$$

получим

$$H_{11}^{eff}(\mathbf{k}) = H_{22}^{eff}(\mathbf{k}) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c}. \quad (2.77)$$

Рассмотрим подробнее матричные элементы эффективного гамильтониана с номерами $a, b = 3, \dots, 8$ (с учетом приближения (2.69)). Согласно (2.76) эти элементы связаны с величинами

$$\left\langle X_k \left(\frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j} + \frac{\partial}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial x_i} \right) X_l \right\rangle \sim T_{kijl} = T_{kjil}, \quad (2.78)$$

обладающими поведением тензора четвертого ранга, симметричного по индексам i, j . Методом прямой проверки нетрудно установить, что в случае кристаллического класса T_d все компоненты T_{kijl} определяются тремя независимыми параметрами, причем отличны от нуля лишь следующие величины:

$$T_{xxxx} = T_{yyyy} = T_{zzzz} \equiv \alpha, \quad (2.79)$$

$$\begin{aligned} T_{xyyx} = T_{yzyz} = T_{zxxz} = \\ = T_{yxx y} = T_{zyyz} = T_{xzzx} \equiv \beta, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} T_{xxyy} = T_{yyzz} = T_{zzxx} = T_{yyxx} = T_{zzyy} = T_{xxzz} = \\ = T_{xyxy} = T_{yzyz} = T_{zxxz} = T_{yxyx} = T_{zyzy} = T_{xzzx} \equiv \gamma. \end{aligned}$$

Этот результат справедлив и для остальных кристаллических классов кубической сингонии. В случае же изотропной среды тензор T_{kijl} , симметричный по ij и инвариантный к произвольным ортогональным преобразованиям координат, определяется только двумя параметрами:

$$T_{kijl}^{изотропн} = \beta \delta_{kl} \delta_{ij} + \gamma (\delta_{ki} \delta_{jl} + \delta_{kj} \delta_{il}),$$

что соответствует формулам (2.79) с $\alpha = \beta + 2\gamma$.

Введем для краткости операторное обозначение, соответствующее формуле (2.34):

$$\hat{M}_{ij}^{-1} = \frac{1}{m_0^2} \sum_{\beta} \frac{\hat{p}_i |u_{\beta}\rangle \langle u_{\beta}| \hat{p}_j + \hat{p}_j |u_{\beta}\rangle \langle u_{\beta}| \hat{p}_i}{\bar{E} - E_{\beta}(0)}. \quad (2.80)$$

Тогда, с учетом явного выражения для $|u_{30}\rangle$ из (2.66), имеем следующий вклад в $H_{33}^{eff}(\mathbf{k})$:

$$\begin{aligned} & \frac{\hbar^2}{2} \sum_i \sum_j k_i k_j (M_{33}^{-1})_{ij} = \frac{\hbar^2}{2} \sum_i \sum_j k_i k_j \langle u_{30} | \hat{M}_{ij}^{-1} | u_{30} \rangle = \\ & = \frac{\hbar^2}{4} \sum_i \sum_j k_i k_j \left(\langle X \hat{M}_{ij}^{-1} X \rangle - i \langle Y \hat{M}_{ij}^{-1} X \rangle + i \langle X \hat{M}_{ij}^{-1} Y \rangle + \langle Y \hat{M}_{ij}^{-1} Y \rangle \right) = \\ & = \frac{\hbar^2}{4} \sum_i \sum_j k_i k_j (T_{xijx} - iT_{yijx} + iT_{xijy} + T_{yijy}) = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\alpha + \beta}{2} (k_x^2 + k_y^2) + \beta k_z^2 \right). \end{aligned}$$

Объединив это выражение с членом $(E_a(0) + \hbar^2 k^2 / 2m_0) \delta_{ab}$, получим:

$$H_{33}^{eff}(\mathbf{k}) = E_v + \frac{\hbar^2}{2} \left(\left(\frac{1}{m_0} + \frac{\alpha + \beta}{2} \right) (k_x^2 + k_y^2) + \left(\frac{1}{m_0} + \beta \right) k_z^2 \right).$$

Если вместо констант α и β , введенных нами в (2.79), определить новые постоянные

$$A = -\frac{\hbar^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{6}(\alpha + 2\beta), \quad (2.81)$$

$$B = \frac{\hbar^2}{6}(\beta - \alpha), \quad (2.82)$$

то найденный матричный элемент окончательно запишется в виде:

$$H_{33}^{eff}(\mathbf{k}) = E_v - \left(A + \frac{B}{2} \right) (k_x^2 + k_y^2) + (B - A) k_z^2.$$

Найдем аналогичным образом матричный элемент $H_{34}^{eff}(\mathbf{k})$:

$$\begin{aligned} H_{34}^{eff}(\mathbf{k}) &= \frac{\hbar^2}{2} \sum_i \sum_j k_i k_j \langle u_{30} | \hat{M}_{ij}^{-1} | u_{40} \rangle = \\ &= \frac{\hbar^2}{2} \sum_i \sum_j k_i k_j \frac{(-1)}{\sqrt{3}} \left(\langle X \hat{M}_{ij}^{-1} Z \rangle - i \langle Y \hat{M}_{ij}^{-1} Z \rangle \right) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2\sqrt{3}} \sum_i \sum_j k_i k_j (T_{xijz} - iT_{yijz}) = -\frac{\hbar^2}{\sqrt{3}} \gamma k_z (k_x - ik_y). \end{aligned}$$

Вводя постоянную

$$D = -\frac{\hbar^2}{\sqrt{3}} \gamma, \quad (2.83)$$

представим $H_{34}^{eff}(\mathbf{k})$ в виде:

$$H_{34}^{eff}(\mathbf{k}) = D k_z (k_x - ik_y).$$

Подобные же простые, но довольно длинные вычисления дают в результате и остальные элементы искомой матрицы $H_{ab}^{eff}(\mathbf{k})$ в базисе (2.66). Оказывается, при этом не возникают новые константы, дополнительные к определенным выше. Отметим, что на практике достаточно провести вычисление треугольной части матрицы эффективного гамильтониана, так как остальные матричные элементы можно получить из условия эрмитовости

$$H_{ba}^{eff}(\mathbf{k}) = H_{ab}^{eff}(\mathbf{k})^*.$$

Найденная матрица $H_{ab}^{eff}(\mathbf{k})$ записывается в виде

	$ u_{10}\rangle$	$ u_{20}\rangle$	$ u_{30}\rangle$	$ u_{40}\rangle$	$ u_{50}\rangle$	$ u_{60}\rangle$	$ u_{70}\rangle$	$ u_{80}\rangle$
$\langle u_{10} $	$\frac{E_c + \hbar^2 k^2}{2m_c}$	0	$\frac{iP}{\sqrt{2}}k_+$	$-i\sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z$	$\frac{-iP}{\sqrt{6}}k_-$	0	$\frac{-iP}{\sqrt{3}}k_z$	$\frac{-iP}{\sqrt{3}}k_-$
$\langle u_{20} $	0	$\frac{E_c + \hbar^2 k^2}{2m_c}$	0	$\frac{iP}{\sqrt{6}}k_+$	$-i\sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z$	$\frac{-iP}{\sqrt{2}}k_-$	$\frac{-iP}{\sqrt{3}}k_+$	$\frac{iP}{\sqrt{3}}k_z$
$\langle u_{30} $	$\frac{-iP}{\sqrt{2}}k_-$	0	F	H	I	0	$\frac{H}{\sqrt{2}}$	$\sqrt{2}I$
$\langle u_{40} $	$i\sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z$	$\frac{-iP}{\sqrt{6}}k_-$	H^*	G	0	I	$\frac{G-F}{\sqrt{2}}$	$-\sqrt{\frac{3}{2}}H$
$\langle u_{50} $	$\frac{iP}{\sqrt{6}}k_+$	$i\sqrt{\frac{2}{3}}Pk_z$	I^*	0	G	$-H$	$-\sqrt{\frac{3}{2}}H^*$	$\frac{F-G}{\sqrt{2}}$
$\langle u_{60} $	0	$\frac{iP}{\sqrt{2}}k_+$	0	I^*	$-H^*$	F	$-\sqrt{2}I^*$	$\frac{H^*}{\sqrt{2}}$
$\langle u_{70} $	$\frac{iP}{\sqrt{3}}k_z$	$\frac{iP}{\sqrt{3}}k_-$	$\frac{H^*}{\sqrt{2}}$	$\frac{G-F}{\sqrt{2}}$	$-\sqrt{\frac{3}{2}}H$	$-\sqrt{2}I$	$\frac{F+G}{2} - \Delta$	0
$\langle u_{80} $	$\frac{iP}{\sqrt{3}}k_+$	$\frac{-iP}{\sqrt{3}}k_z$	$\sqrt{2}I^*$	$-\sqrt{\frac{3}{2}}H^*$	$\frac{F-G}{\sqrt{2}}$	$\frac{H}{\sqrt{2}}$	0	$\frac{F+G}{2} - \Delta$

(2.84)

где

$$k_{\pm} = k_x \pm ik_y, \quad (2.85)$$

$$P = \frac{i\hbar}{m_0} \langle S \hat{p}_x X \rangle = \frac{\hbar^2}{m_0} \int d^3 \mathbf{r} S \frac{\partial X}{\partial x}, \quad (2.86)$$

$$\left. \begin{aligned} F &= E_v - \left(A + \frac{B}{2}\right)(k_x^2 + k_y^2) - (A - B)k_z^2, \\ G &= E_v - \left(A - \frac{B}{2}\right)(k_x^2 + k_y^2) - (A + B)k_z^2, \\ H &= Dk_z k_-, \\ I &= \frac{\sqrt{3}}{2} B(k_x^2 - k_y^2) - iDk_x k_y, \end{aligned} \right\} \quad (2.87)$$

$m_c, E_c, E_v, \Delta, P, A, B, D$ – зонные параметры.

Матрица (2.84) называется ***kp***-гамильтонианом обобщенной восьмизонной модели Кейна. В этой модели посредством линейных по **k** членов с параметром *P* учитывается прямое взаимодействие зоны проводимости (Γ_6) и валентных зон (Γ_8, Γ_7), а за счет квадратичных по **k** членов *F, G, H, I*, учитывается также и не прямое взаимодействие между валентными зонами, индуцированное влиянием всех более далеких зон. В такой модели закон дисперсии $E_n(\mathbf{k})$ для каждой из рассматриваемых зон $\Gamma_6, \Gamma_8, \Gamma_7$ определяется собственными значениями матрицы (2.84), то есть корнями характеристического (секулярного) уравнения восьмой степени для *E*:

$$\det[H_{ab}^{eff}(\mathbf{k}) - E \delta_{ab}] = 0. \quad (2.88)$$

Рассмотрим теперь вклад релятивистских линейных по **k** членов из (2.67). Ограничимся выводом матричных элементов для состояний валентной зоны Γ_8 (с номерами 3, ..., 6), которые без учета указанного релятивистского вклада в $(\hbar/m_0)\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\pi}_{ab}$ не имеют линейных по волновому вектору слагаемых:

$$H'_{ab}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} \sum_{i,j,k=x,y,z} k_j e_{jik} \langle u_{a0} | \frac{\partial V}{\partial x_k} \hat{\sigma}_i | u_{b0} \rangle. \quad (2.89)$$

Величины (2.89) содержат интегралы

$$\left\langle X_l \frac{\partial V}{\partial x_k} X_m \right\rangle \equiv t_{lkm}, \quad (2.90)$$

обладающие при преобразованиях симметрии свойствами компонент тензора третьего ранга:

$$t_{lkm} \sim x_l x_k x_m. \quad (2.91)$$

Если $V(-\mathbf{r}) = V(\mathbf{r})$, то подынтегральное выражение в (2.90) изменяет свой знак при изменении знака одной или всех трех проекций радиус-вектора, и поэтому интеграл (2.90) должен обратиться в нуль. Другими

словами, если в группу симметрии кристалла входит операция инверсии координат ($x \rightarrow -x, y \rightarrow -y, z \rightarrow -z$), то тензор третьего ранга (2.91), инвариантный к преобразованиям из группы симметрии, равен нулю. Так обстоит дело, например, в случае кристаллов Ge и Si, точечная симметрия которых совпадает с полной симметрией куба O_h . Однако группа симметрии T_d , свойственная кристаллам полупроводниковых соединений III–V с решеткой цинковой обманки, не содержит инверсии и допускает существование ненулевого тензора (2.90). Такой же вывод виден из того, что в отсутствие центра инверсии потенциал $V(\mathbf{r})$ не обладает определенной четностью и, следовательно, подынтегральное выражение для (2.90) в этом случае нечетной функцией не является. Методом прямой проверки легко убедиться, что отличны от нуля (и при этом равны друг другу) лишь следующие компоненты тензора (2.90):

$$\begin{aligned} t_{xyz} &= t_{yzx} = t_{zxy} = \\ &= t_{yxz} = t_{xzy} = t_{zyx}. \end{aligned} \quad (2.92)$$

Учитывая равенства (2.92) при вычислении матрицы (2.89) с $a, b = 3, \dots, 6$ и вводя постоянную

$$\tau = \frac{1}{\sqrt{3}} \frac{\hbar^2}{4m_0^2 c^2} t_{xyz}, \quad (2.93)$$

получим для $H'_{ab}(\mathbf{k})$ в базисе (2.66) следующий результат:

	$ u_{30}\rangle$	$ u_{40}\rangle$	$ u_{50}\rangle$	$ u_{60}\rangle$
$\langle u_{30} $	0	τk_+	$-2\tau k_z$	$\sqrt{3}\tau k_-$
$\langle u_{40} $	τk_-	0	$-\sqrt{3}\tau k_+$	$2\tau k_z$
$\langle u_{50} $	$-2\tau k_z$	$-\sqrt{3}\tau k_-$	0	τk_+
$\langle u_{60} $	$\sqrt{3}\tau k_+$	$2\tau k_z$	τk_-	0

(2.94)

Элементы этой матрицы прибавляются к матричным элементам (2.84) с номерами $a, b = 3, \dots, 6$.

Дальнейший анализ показывает, что учет вклада (2.94) в гамильтониан Кейна (2.84) приводит к спиновому расщеплению ветвей валентной зоны вне Γ -точки. Спиновое расщепление зон в кристаллах с симметрией T_d вызывают также не учтенные в (2.84) члены *kp*-возмущения, начиная с третьего порядка по \mathbf{k} , причем среди них есть нерелятивистские члены и они могут доминировать [5]. На практике, если речь не идет о наблюдении физических эффектов, обусловленных именно спиновым расщеплением, как правило, пренебрегают изменением зонной картины, возникающим за счет этого расщепления.

2.1.5. Непараболичность зон в модели Кейна

Корни секулярного уравнения (2.88) в общем случае можно найти только численным методом. Однако для выявления качественных черт модельного зонного спектра целесообразно пренебречь частью информации, содержащейся в гамильтониане (2.84). С этой точки зрения обобщенный гамильтониан Кейна (2.84) служит источником многих «моделей Кейна» разного уровня сложности, которые можно извлекать из (2.84), пренебрегая частью матричных элементов или понижая размер матрицы эффективного гамильтониана. Рассмотрим простейшие из моделей.

Начнем с того, что пренебрежем в (2.84) всеми квадратичными по \mathbf{k} членами (и не будем учитывать линейный по \mathbf{k} релятивистский вклад (2.94), снимающий крамерово вырождение). В таком приближении величины H и I полагаются равными нулю, F и G будут равны постоянной E_v . При этом в гамильтониане остаются только параметры P и Δ (наряду с уровнями краев зон E_c , E_v), которые, как отмечалось по ходу их определения, задаются в тензорных структурах, свойственных изотропной среде. Следовательно, гамильтониан Кейна (2.84) без квадратичных членов определяет *изотропную модель* энергетического спектра – в ней ветви $E_n(k)$ зависят только от величины волнового вектора $k = |\mathbf{k}|$, но не от его направления. Это позволяет без дальнейшей потери общности

ограничиться рассмотрением спектра с заданным направлением волнового вектора, положив:

$$k_x = k_y = 0, \quad k = k_z > 0. \quad (2.95)$$

При этом в гамильтониане Кейна (2.84) обращаются в нуль матричные элементы с $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$, и система восьми однородных алгебраических уравнений (2.31) для коэффициентов $C_a(\mathbf{k})$, определяющих волновые функции (2.28) в базисе (2.66), распадается на три не связанные друг с другом системы. Эти системы уравнений мы выпишем в символическом виде, выделив, для удобства, коэффициенты при неизвестных C_a в форме матриц:

$$\begin{pmatrix} E_c - E & -i\sqrt{2/3}Pk_z & -iPk_z/\sqrt{3} \\ i\sqrt{2/3}Pk_z & E_v - E & 0 \\ iPk_z/\sqrt{3} & 0 & E_v - \Delta - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_4 \\ C_7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.96)$$

$$\begin{pmatrix} E_c - E & -i\sqrt{2/3}Pk_z & iPk_z/\sqrt{3} \\ i\sqrt{2/3}Pk_z & E_v - E & 0 \\ -iPk_z/\sqrt{3} & 0 & E_v - \Delta - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_2 \\ C_5 \\ C_8 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.97)$$

$$\begin{pmatrix} E_v - E & 0 \\ 0 & E_v - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_3 \\ C_6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.98)$$

Характеристическое уравнение системы (2.98),

$$(E_v - E)^2 = 0,$$

имеет двукратный корень $E = E_v$, который не зависит от k . Это решение описывает двукратно вырожденную по спину зону тяжелых дырок (hh):

$$E_{hh}(k) = E_v = \text{const}, \quad (2.99)$$

которая в рассматриваемом приближении (без учета квадратичных членов в $k\rho$ -гамильтониане) оказывается бездисперсионной – эффективная масса тяжелых дырок в этой модели бесконечно велика.

Характеристические уравнения систем (2.96) и (2.97) одинаковы. Каждая из систем (2.96) и (2.97) описывает взаимодействующие друг с другом зону проводимости (el), зону легких дырок (lh) и зону спин-орбитально отщепленных дырок (so). Тот факт, что этих систем две, обусловлен двукратным крамеровским вырождением каждой из указанных ветвей энергетического спектра, поэтому достаточно рассматривать только одну систему, например (2.96).

Рассмотрим теперь случай материала с большим спин-орбитальным расщеплением: $\Delta \gg E_g$. В этом случае можно еще более упростить модель, исключив из рассмотрения спин-орбитально отщепленную зону, «далекую» по отношению к зоне легких дырок и к зоне проводимости. Действительно, из третьего уравнения системы (2.96) видно, что для состояний вблизи потолка зоны легких дырок или в зоне проводимости, когда коэффициент C_1 не мал, коэффициент $C_7 \propto (E_v - \Delta - E)^{-1} C_1$ будет мал из-за энергетического знаменателя с большой величиной Δ . Таким образом, вычеркивая в матрицах (2.96)–(2.97) третью строку и третий столбец, мы приходим к простейшей из моделей Кейна – двухзонной (четырёхзонной с учетом двукратного вырождения по спину) модели изотропного энергетического спектра.

a) Двухзонная изотропная модель Кейна. Эффективный гамильтониан этой модели имеет вид:

$$\hat{H}^{eff}(k_z) = \begin{pmatrix} E_c & -i\sqrt{2/3}Pk_z \\ i\sqrt{2/3}Pk_z & E_v \end{pmatrix}. \quad (2.100)$$

Волновые функции электрона (2.28) здесь определяются двумя коэффициентами C_a (для них можно ввести номера 1, 2, но мы сохраним прежнюю нумерацию базисных функций),

$$|\Psi_{\mathbf{k}}\rangle = C_1(k_z)e^{ik_z z}|u_{10}\rangle + C_4(k_z)e^{ik_z z}|u_{40}\rangle, \quad (2.101)$$

удовлетворяющими системе двух однородных уравнений (2.31)

$$\begin{cases} (E_c - E)C_1 - i\sqrt{2/3}Pk_z C_4 = 0 \\ i\sqrt{2/3}Pk_z C_1 + (E_v - E)C_4 = 0 \end{cases}. \quad (2.102)$$

Характеристическое уравнение этой системы имеет вид

$$(E_c - E)(E_v - E) - \frac{2}{3}P^2k^2 = 0, \quad (2.103)$$

где мы учли, что $k_z = k = |\mathbf{k}|$ – величина трехмерного волнового вектора. Два корня квадратного уравнения (2.103),

$$E = E_c - \frac{E_g}{2} \pm \sqrt{\frac{E_g^2}{4} + \frac{2}{3}P^2k^2},$$

описывают закон дисперсии в зоне проводимости (el) и в валентной зоне (lh), отделенных друг от друга энергетической щелью $E_g = E_c - E_v$,

$$E_{el}(k) = E_c - \frac{E_g}{2} + \frac{E_g}{2} \sqrt{1 + \frac{8P^2}{3E_g^2}k^2}, \quad E_{lh}(k) = E_c - \frac{E_g}{2} - \frac{E_g}{2} \sqrt{1 + \frac{8P^2}{3E_g^2}k^2}. \quad (2.104)$$

Каждой из двух ветвей энергетического спектра (2.104) принадлежит соответствующее решение системы (2.102). Такие решения удобно представлять в форме столбцов \hat{C} с компонентами C_a . Без учета нормировки столбцов на единицу имеем:

$$\hat{C}_{el}(k_z) \equiv \begin{pmatrix} C_1 \\ C_4 \end{pmatrix}_{el} = \begin{pmatrix} 1 \\ -i\sqrt{2/3}Pk_z \\ E_v - E_{el}(k_z) \end{pmatrix}, \quad \hat{C}_{lh}(k_z) \equiv \begin{pmatrix} C_1 \\ C_4 \end{pmatrix}_{lh} = \begin{pmatrix} i\sqrt{2/3}Pk_z \\ E_c - E_{lh}(k_z) \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.105)$$

Несмотря на свою простоту, двухзонная модель демонстрирует все основные черты многозонных моделей Кейна – непараболичность зон, связь эффективной массы носителей заряда с шириной запрещенной зоны, перемешивание волновых функций. Действительно, из (2.104) видно, что в обеих ветвях спектра энергия электрона зависит от импульса $\hbar k$ не по квадратичному закону; эта непараболичность иллюстрируется графиками на рис. 2.2. Лишь вблизи краев зон закон дисперсии стремится к

параболическому, так как разложение корня в (2.104) в ряд по степеням малой величины $8P^2k^2/(3E_g^2) \ll 1$ в первом приближении дает:

$$E_{el}(k)|_{k \rightarrow 0} = E_c + \frac{2P^2}{3E_g}k^2 \equiv E_c + \frac{\hbar^2k^2}{2m}, \quad (2.106)$$

$$E_{lh}(k)|_{k \rightarrow 0} = E_c - E_g - \frac{2P^2}{3E_g}k^2 \equiv E_v - \frac{\hbar^2k^2}{2m}, \quad (2.107)$$

где эффективная масса m электрона на краях обеих зон определяется формулой:

$$\frac{\hbar^2}{2m} = \frac{2P^2}{3E_g}. \quad (2.108)$$

Эта формула показывает, что эффективная масса тем меньше, чем меньше величина запрещенной зоны.

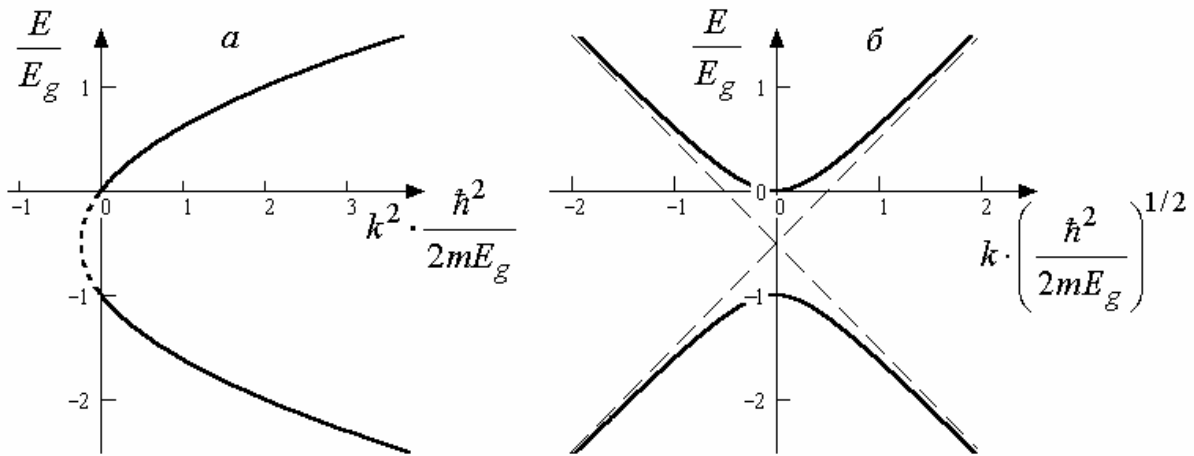


Рис. 2.2. Энергетический спектр электрона в двухзонной изотропной модели Кейна.

a – график зависимости $E(k^2)$, полученный из графика зависимости $k^2(E)$, которая следует из дисперсионного уравнения модели (2.103). Энергия E и волновой вектор k представлены здесь безразмерными величинами. Непараболичность зон проявляется на этом графике в непрямолинейности кривых, изображающих зоны. Пунктиром показана часть кривой $k^2(E)$ в области $k^2 < 0$, то есть – в области мнимых значений волнового вектора k , отвечающей на шкале энергии запрещенной зоне. $б$ – график $E(k)$; непараболичность зон проявляется на нем в спрямлении кривых в области $|E| \gg E_g$. Пунктиром показаны асимптотики, к

которым ветви спектра стремятся в области больших значений энергии. Спектр этого вида иногда называют «дираковским» – из-за внешнего сходства с результатом решения уравнения Дирака [12], которое в релятивистской квантовой теории описывает ветви энергетического спектра электронов и позитронов в вакууме.

Непараболичность зон сопровождается смешиванием волновых функций валентной зоны и зоны проводимости. Действительно, лишь в точке $k = 0$ решения (2.105) имеют простой вид

$$\hat{C}_{el}(0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{C}_{lh}(0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (2.109)$$

соответствующий наличию у волновой функции (2.101) на краях зон только одной ненулевой компоненты. С увеличением k в каждом из двух решений появляется «примесь» другой базисной функции, поскольку обе компоненты C_a в (2.105) становятся отличными от нуля.

б) *Трехзонная модель Кейна* для изотропных ветвей el , lh , so , без учета ветви тяжелых дырок hh . Эффективный гамильтониан этой модели отвечает системе уравнений (2.96) (в силу двукратного крамерсова вырождения зон можно с тем же успехом рассматривать систему (2.97)):

$$\hat{H}^{eff}(k_z) = \begin{pmatrix} E_c & -i\sqrt{2/3}Pk_z & -iPk_z/\sqrt{3} \\ i\sqrt{2/3}Pk_z & E_v & 0 \\ iPk_z/\sqrt{3} & 0 & E_v - \Delta \end{pmatrix}. \quad (2.110)$$

Характеристическим уравнением систем (2.96) и (2.97) является алгебраическое уравнение третьей степени относительно E :

$$(E_c - E)(E_v - E)(E_v - \Delta - E) - P^2k^2(E_v - E - 2\Delta/3) = 0, \quad (2.111)$$

где мы учли, что $k_z = k = |\mathbf{k}|$. Это уравнение имеет три корня – $E_{el}(k)$, $E_{lh}(k)$, $E_{so}(k)$. Формулы корней громоздки, поэтому гораздо удобнее анализировать зависимость $k^2(E)$, которая непосредственно видна из (2.111):

$$k^2(E) = \frac{1}{P^2} \frac{(E - E_c)(E - E_v)(E - E_v + \Delta)}{(E - E_v + 2\Delta/3)}. \quad (2.112)$$

График функции (2.112) при горизонтальном расположении оси k^2 изображает ветви энергетического спектра как функции аргумента k^2 , что позволяет затем построить и зависимости $E_{el}(k)$, $E_{lh}(k)$, $E_{so}(k)$; результат представлен на рис. 2.3–2.4.

Все три ветви непараболичны, квадратичная зависимость энергии от волнового вектора приближенно восстанавливается лишь вблизи краев зон. Так, для описания в параболическом приближении состояний вблизи дна зоны проводимости можно во всех скобках выражения (2.112), кроме первой скобки числителя, положить $E = E_c$; это дает $E - E_c \approx \hbar^2 k^2 / (2m)$, где эффективная масса электрона m определяется формулой

$$\frac{\hbar^2}{2m} = \frac{P^2(E_g + 2\Delta/3)}{E_g(E_g + \Delta)} = \frac{P^2}{3} \left(\frac{2}{E_g} + \frac{1}{E_g + \Delta} \right). \quad (2.113)$$

Аналогичным образом для эффективных масс lh- и so-дырков получим:

$$\frac{\hbar^2}{2m_{lh}} = \frac{2P^2}{3E_g}, \quad \frac{\hbar^2}{2m_{so}} = \frac{P^2}{3(E_g + \Delta)}. \quad (2.114)$$

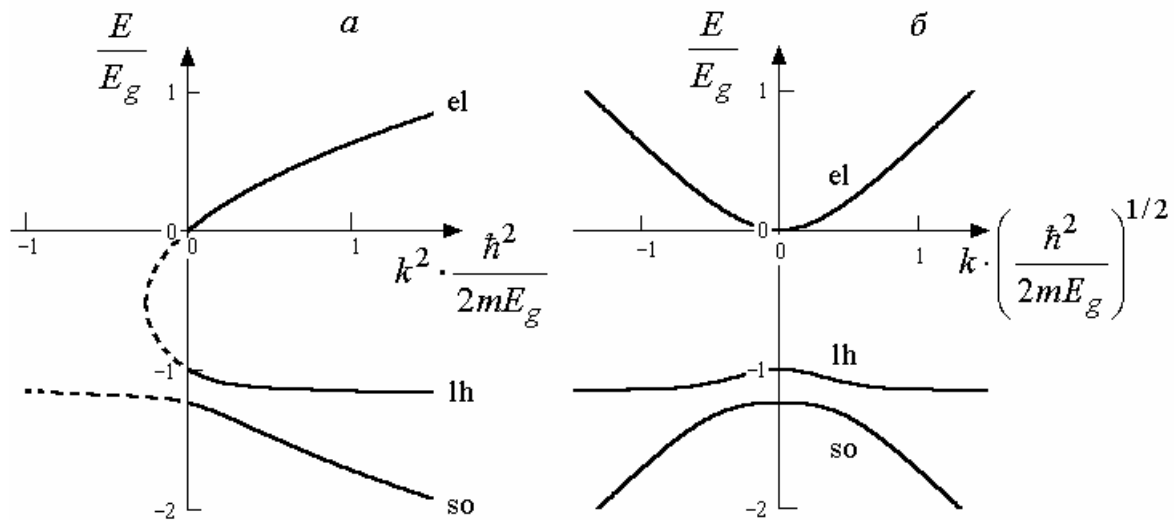


Рис. 2.3. Энергетический спектр электрона в трехзонной изотропной модели Кейна.

Модель включает зону проводимости (el), зону легких дырков (lh) и зону спин-орбитально отщепленных дырков (so). Способ представления спектра здесь такой же, как на рис. 2.2, но масса m теперь определяется формулой (2.113).

Относительная величина спин-орбитального расщепления $\Delta/E_g = 0,24$, что характерно для полупроводникового материала GaAs. Для оценок можно считать, что в этом материале при комнатной температуре $E_g = 1,42$ эВ, $m/m_0 = 0,067$ – эффективная масса электрона на дне зоны проводимости.

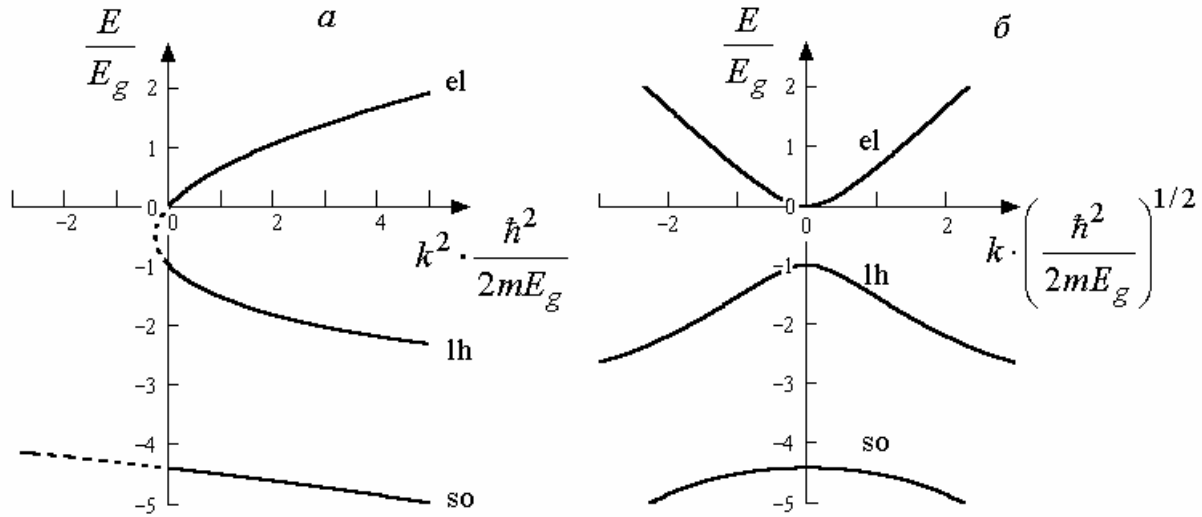


Рис. 2.4. Энергетический спектр электрона в трехзонной изотропной модели Кейна при относительной величине спин-орбитального расщепления $\Delta/E_g = 3,4$. Такое значение приблизительно соответствует InSb. Для оценок можно считать, что в этом материале при комнатной температуре $E_g = 0,18$ эВ, $m/m_0 = 0,013$ – эффективная масса электрона на дне зоны проводимости.

Основное достоинство модели Кейна с гамильтонианом, не содержащим квадратичных по \mathbf{k} членов, заключается в том, что она дает много качественной информации о сложном зонном спектре и волновых функциях при малом числе параметров. Но такой подход имеет и недостатки. Так, задавая экспериментально найденные значения энергетических щелей E_g , Δ и варьируя единственный подгоночный параметр P , не удастся по формулам (2.113)–(2.114) точно воспроизвести экспериментально наблюдаемые значения эффективных масс одновременно для трех экстремумов (el, lh, so). Наименее удовлетворительным здесь является описание зоны тяжелых дырок (hh) – гамильтониан Кейна (2.84) с отброшенными квадратичными членами ($A = B = D = 0$) приводит к результату (2.99), означающему, что в такой модели $m_{hh} = \infty$.

в) Трехзонная изотропная модель с параболической зоной hh , с непараболическими зонами el , lh , без учета so -зоны. Снова пренебрежем so -зоной, отбросив в гамильтониане (2.84) все матричные элементы с номерами 7, 8 (относящиеся к so -зоне Γ_7). Это допустимо, например, при рассмотрении дырок с энергией вблизи E_v , когда $|E - E_v| \ll \Delta$. Кроме того, ограничимся изотропной моделью, полагая в (2.79) $\gamma = (\alpha - \beta)/2$. Тогда, согласно формулам (2.82)–(2.83), можно исключить в (2.84)–(2.87) параметр D , если выразить его через параметр B :

$$D = \sqrt{3} B. \quad (2.115)$$

Изотропия модели позволяет без ущерба для общности положить:

$$k_z = 0, \quad k^2 = k_x^2 + k_y^2, \quad (2.116)$$

так что рассматриваемый kp -гамильтониан размером 6×6 принимает вид:

	$ u_{10}\rangle$	$ u_{20}\rangle$	$ u_{30}\rangle$	$ u_{40}\rangle$	$ u_{50}\rangle$	$ u_{60}\rangle$
$\langle u_{10} $	$\frac{E_c + \hbar^2 k^2}{2m_c}$	0	$\frac{iP}{\sqrt{2}} k_+$	0	$\frac{-iP}{\sqrt{6}} k_-$	0
$\langle u_{20} $	0	$\frac{E_c + \hbar^2 k^2}{2m_c}$	0	$\frac{iP}{\sqrt{6}} k_+$	0	$\frac{-iP}{\sqrt{2}} k_-$
$\langle u_{30} $	$\frac{-iP}{\sqrt{2}} k_-$	0	F	0	I	0
$\langle u_{40} $	0	$\frac{-iP}{\sqrt{6}} k_-$	0	G	0	I
$\langle u_{50} $	$\frac{iP}{\sqrt{6}} k_+$	0	I^*	0	G	0
$\langle u_{60} $	0	$\frac{iP}{\sqrt{2}} k_+$	0	I^*	0	F

(2.117)

где

$$\left. \begin{aligned}
F &= E_v - \left(A + \frac{B}{2}\right)(k_x^2 + k_y^2), \\
G &= E_v - \left(A - \frac{B}{2}\right)(k_x^2 + k_y^2), \\
I &= \frac{\sqrt{3}}{2} B k_-^2, \\
k_{\pm} &= k_x \pm i k_y.
\end{aligned} \right\} \quad (2.118)$$

Легко заметить, что гамильтониан (2.117) описывает взаимодействие между базисными состояниями с номерами 1, 3, 5, а также взаимодействие между состояниями 2, 4, 6, но друг с другом эти два набора состояний не взаимодействуют (соответствующие матричные элементы равны нулю). Поэтому система шести однородных алгебраических уравнений (2.31) для коэффициентов $C_a(\mathbf{k})$, определяющих волновые функции (2.28) в базисе (2.66) с исключенными Γ_7 -состояниями, распадается на две независимые системы – по три уравнения в каждой. В силу двукратного крамерсова вырождения обе системы определяют одинаковые ветви энергетического спектра, так что можно рассматривать только одну из систем, например, для $C_a(\mathbf{k})$ с номерами 1, 5, 3 (последовательность номеров не играет принципиальной роли).

Выпишем возникающий таким образом эффективный гамильтониан 3×3 с дополнительным упрощением – без квадратичного по k слагаемого в первом диагональном элементе:

	$ u_{10}\rangle$	$ u_{50}\rangle$	$ u_{30}\rangle$
$\langle u_{10} $	E_c	$\frac{-iP}{\sqrt{6}}k_-$	$\frac{iP}{\sqrt{2}}k_+$
$\langle u_{50} $	$\frac{iP}{\sqrt{6}}k_+$	$E_v - \left(A - \frac{B}{2}\right)k^2$	$\sqrt{3}\frac{B}{2}k_+^2$
$\langle u_{30} $	$\frac{-iP}{\sqrt{2}}k_-$	$\sqrt{3}\frac{B}{2}k_-^2$	$E_v - \left(A + \frac{B}{2}\right)k^2$

(2.119)

Такое упрощение отвечает бесконечному значению параметра m_c в (2.117); оно обсуждается ниже.

Можно проверить, что характеристическое уравнение для $E(k)$ в этой модели приводится к виду:

$$\left(E_v - (A - B)k^2 - E \right) \left((E_c - E)(E_v - (A + B)k^2 - E) - \frac{2}{3}P^2k^2 \right) = 0. \quad (2.120)$$

Один из трех корней кубического уравнения (2.120) соответствует обращению в нуль первой скобки в (2.120) и интерпретируется как ветвь тяжелых дырок с параболическим законом дисперсии:

$$E_{hh}(k) = E_v - \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{hh}}, \quad (2.121)$$

где

$$\frac{\hbar^2}{2m_{hh}} = A - B. \quad (2.122)$$

Два других корня соответствуют обращению в нуль второй скобки в (2.120) и интерпретируются как ветви зоны проводимости и зоны легких дырок с непараболическим законом дисперсии (см. рис. 2.5). Они даются формулами:

$$E_{el}(k) = E_c - \frac{1}{2} \left(E_g + (A + B)k^2 \right) + \sqrt{\frac{1}{4} \left(E_g + (A + B)k^2 \right)^2 + \frac{2}{3}P^2k^2}, \quad (2.123)$$

$$E_{lh}(k) = E_c - \frac{1}{2} \left(E_g + (A + B)k^2 \right) - \sqrt{\frac{1}{4} \left(E_g + (A + B)k^2 \right)^2 + \frac{2}{3}P^2k^2}, \quad (2.124)$$

В квадратичном приближении эти зоны характеризуются массой электронов m и массой дырок m_{lh} , которые определяются выражениями:

$$\frac{\hbar^2}{2m} = \frac{2P^2}{3E_g}, \quad \frac{\hbar^2}{2m_{lh}} = A + B + \frac{2P^2}{3E_g}. \quad (2.125)$$

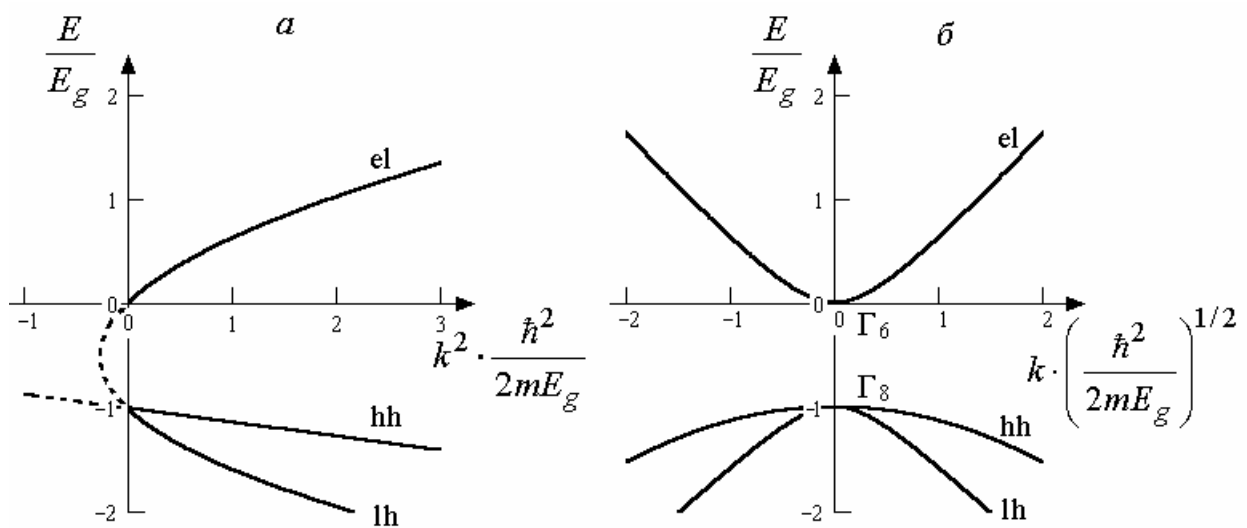


Рис. 2.5. Энергетический спектр в трехзонной изотропной модели с учетом квадратичных по \mathbf{k} членов для валентных зон Γ_8 .

В этой модели спин-орбитально отщепленная зона Γ_7 не учитывается. Параметры A , B , P^2/E_g здесь выбраны так, чтобы по формулам (2.122) и (2.125) воспроизводились значения эффективных масс $m = 0,067 m_0$, $m_{lh} = 0,07 m_0$, $m_{hh} = 0,5 m_0$, примерно соответствующие GaAs.

Таким образом, в модели с гамильтонианом (2.119) (или (2.117)) кейновский параметр P определяет эффективные массы и величину непараболичности только в зонах легких частиц (el, lh), тогда как зона тяжелых дырок (hh) оказывается параболической и задается параметром $A-B$. Трех параметров A , B , P как раз достаточно для того, чтобы при заданной ширине запрещенной зоны E_g воспроизвести по формулам (2.122) и (2.125) усредненные соответственно изотропному приближению экспериментальные значения эффективных масс m , m_{lh} , m_{hh} .

Рассмотрим усложнения, возникающие при учете в (2.119) (или (2.117)) квадратичной по k добавки $\hbar^2 k^2 / (2m_c)$ к уровню E_c . Эта добавка не сказывается на описании ветви тяжелых дырок, но уравнение для легких частиц изменяется. Вместо уравнения первой степени по k^2 , следовавшего из (2.120), мы получим квадратное уравнение для зависимости $k^2(E)$ в зонах легких частиц:

$$\left(E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_c} - E \right) \left(E_v - (A+B)k^2 - E \right) - \frac{2}{3} P^2 k^2 = 0. \quad (2.126)$$

В пределе с $k \rightarrow 0$ отсюда следует, что масса легких дырок по-прежнему определяется выражением (2.125), но масса m электрона на дне зоны проводимости теперь зависит от двух параметров, P и m_c :

$$\frac{\hbar^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m_c} + \frac{2P^2}{3E_g}. \quad (2.127)$$

В результате, при подгонке m в (2.127) под экспериментальное значение эффективной массы электрона на дне зоны проводимости появляется свобода в выборе значения кейновского параметра P , управляющего непараболичностью ветвей легких частиц. Так, при $P = 0$ ($m_c = m$) уравнение (2.126) будет описывать не связанные друг с другом параболические зоны e1 и lh; при этом вся модель (2.119) перейдет в совокупность трех независимых однозонных моделей. С увеличением P (и m_c при фиксированном m) возникает взаимодействие зон e1–lh, сопровождающееся появлением непараболичности закона дисперсии в этих зонах. В пределе с $m_c \gg m$ мы возвращаемся к рассмотренному выше энергетическому спектру (2.123)–(2.124).

Поскольку квадрат волнового вектора входит в уравнение (2.126) во второй степени, это уравнение имеет два корня $k^2(E)$; поведение корней иллюстрирует рис. 2.6.

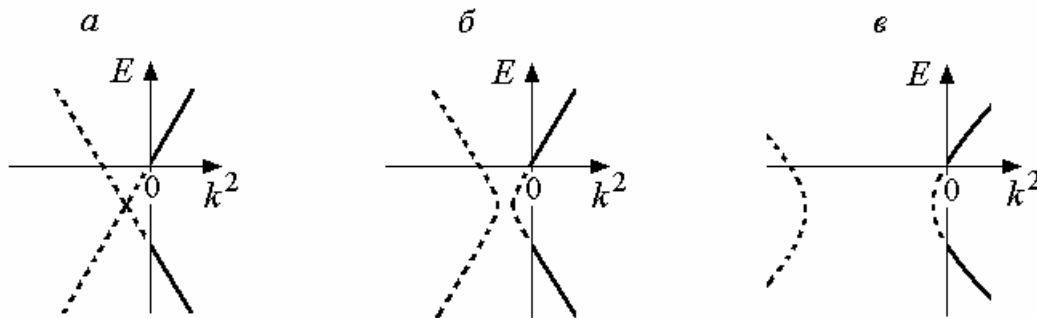


Рис. 2.6. Поведение двух корней $k^2(E)$ дисперсионного уравнения (2.126). *a* – при $m_c = m = 0,067 m_0$ ($P = 0$) оба корня описывают линейную зависимость $k^2(E)$ (параболический закон дисперсии), их графики имеют вид двух пересекающихся прямых. Значения параметров A , B , E_g – такие же, как на рис. 2.5. *б* – при $m_c = 0,07 m_0$ вместо пересечения прямых наблюдается «антипересечение» кривых. Одна из кривых имеет участки в области $k^2 > 0$, отвечающие энергетическим зонам легких частиц; участок с $k^2 < 0$ (показан пунктиром) соответствует запрещенной зоне. Вторая кривая (пунктир)

полностью лежит в области $k^2 < 0$. v – при $m_c = 0,12 m_0$ эта кривая смещается еще глубже в область отрицательных значений k^2 ; в пределе с $m_c \rightarrow \infty$ она уходит на бесконечность.

Таким образом, при $m_c = m$ ($P = 0$) каждый из двух корней описывает отдельную ветвь спектра (с параболическим законом дисперсии), а в случаях с $P \neq 0$ один корень k^2 оказывается отрицательным при всех значениях энергии E – этот корень не имеет ясного физического смысла.

При изучении энергетического спектра объемного (однородного) кристалла область $k^2 < 0$ не играет роли. Однако в задачах об уровнях энергии в гетероструктурах решения с мнимым волновым вектором ($k^2 < 0$) важны – им соответствуют хвосты волновых функций в области энергетических барьеров. Появление лишнего, нефизического решения в таких задачах нежелательно [6]. Поскольку введение параметра m_c добавляет мало нового к описанию непараболичности, но порождает нефизическое решение дисперсионного уравнения, нередко представляется разумным не учитывать член $\hbar^2 k^2 / (2m_c)$ в гамильтонианах моделей Кейна.

г) «Четырехзонная» модель Кейна 8×8 без квадратичных членов, с произвольным направлением \mathbf{k} . Вернемся к эффективному гамильтониану 8×8 (2.84)–(2.87), полагая в нем $A = B = D = 0$, $m_c = \infty$. Как мы уже знаем, в этом случае гамильтониан (2.84) не содержит квадратичных по волновому вектору членов и описывает изотропный энергетический спектр, состоящий из четырех двукратно вырожденных по спину ветвей: e_l , l_h , s_o и h_h (с массой $m_{hh} = \infty$). Покажем, что уравнения (2.31) в этой модели могут быть записаны в компактной спинорно-векторной форме [13], причем они сводятся к одному спинорному уравнению с эффективной массой, зависящей от энергии.

В указанном приближении система восьми однородных алгебраических уравнений (2.31) для коэффициентов $C_a(\mathbf{k})$, определяющих волновые функции (2.28) в базисе (2.66), имеет вид:

$$\begin{cases} (E_c - E)C_1 + \frac{iPk_+}{\sqrt{2}}C_3 - i\sqrt{\frac{2}{3}}Pk_zC_4 - \frac{iPk_-}{\sqrt{6}}C_5 - \frac{iPk_z}{\sqrt{3}}C_7 - \frac{iPk_-}{\sqrt{3}}C_8 = 0 \\ (E_c - E)C_2 + \frac{iPk_+}{\sqrt{6}}C_4 - i\sqrt{\frac{2}{3}}Pk_zC_5 - \frac{iPk_-}{\sqrt{2}}C_6 - \frac{iPk_+}{\sqrt{3}}C_7 + \frac{iPk_z}{\sqrt{3}}C_8 = 0 \end{cases}, \quad (2.128)$$

$$\begin{cases} (E_v - E)C_3 - \frac{iPk_-}{\sqrt{2}}C_1 = 0 \\ (E_v - E)C_4 + i\sqrt{\frac{2}{3}}Pk_zC_1 - \frac{iPk_-}{\sqrt{6}}C_2 = 0 \\ (E_v - E)C_5 + \frac{iPk_+}{\sqrt{6}}C_1 + i\sqrt{\frac{2}{3}}Pk_zC_2 = 0 \\ (E_v - E)C_6 + \frac{iPk_+}{\sqrt{2}}C_2 = 0 \end{cases}, \quad (2.129)$$

$$\begin{cases} (E_v - \Delta - E)C_7 + \frac{iPk_z}{\sqrt{3}}C_1 + \frac{iPk_-}{\sqrt{3}}C_2 = 0 \\ (E_v - \Delta - E)C_8 + \frac{iPk_+}{\sqrt{3}}C_1 - \frac{iPk_z}{\sqrt{3}}C_2 = 0 \end{cases}. \quad (2.130)$$

Из уравнений (2.129)–(2.130) легко выразить коэффициенты $C_3(\mathbf{k}), \dots, C_8(\mathbf{k})$ через C_1, C_2 :

$$\begin{aligned} C_3 &= \frac{-iP}{\sqrt{2}} \frac{k_-}{E - E_v} C_1, \\ C_4 &= \frac{iP}{\sqrt{6}} \frac{1}{E - E_v} (2k_z C_1 - k_- C_2), \\ C_5 &= \frac{iP}{\sqrt{6}} \frac{1}{E - E_v} (k_+ C_1 + 2k_z C_2), \\ C_6 &= \frac{iP}{\sqrt{2}} \frac{k_+}{E - E_v} C_2, \\ C_7 &= \frac{iP}{\sqrt{3}} \frac{1}{E - E_v + \Delta} (k_z C_1 + k_- C_2), \\ C_8 &= \frac{iP}{\sqrt{3}} \frac{1}{E - E_v + \Delta} (k_+ C_1 - k_z C_2). \end{aligned} \quad (2.131)$$

Подстановка этих выражений в (2.128) дает для C_1, C_2 пару одинаковых уравнений:

$$\left. \begin{aligned} \left[(E_c - E) + \frac{P^2 k^2}{3} \left(\frac{2}{E - E_v} + \frac{1}{E - E_v + \Delta} \right) \right] C_1 &= 0 \\ \left[(E_c - E) + \frac{P^2 k^2}{3} \left(\frac{2}{E - E_v} + \frac{1}{E - E_v + \Delta} \right) \right] C_2 &= 0 \end{aligned} \right\}. \quad (2.132)$$

Видно, что решения с ненулевыми значениями C_1 или C_2 существуют лишь при условии обращения в нуль имеющегося в (2.132) выражения в квадратных скобках. Это условие совпадает с рассмотренным выше секулярным уравнением третьей степени (2.111). При выполнении такого условия коэффициенты $C_3(\mathbf{k}), \dots, C_8(\mathbf{k})$ можно определить через произвольно задаваемые C_1, C_2 с помощью соотношений (2.131), после чего все коэффициенты должны быть подчинены условию нормировки:

$$\sum_{a=1}^8 |C_a(\mathbf{k})|^2 = 1. \quad (2.133)$$

Следуя Р.А. Сурису [13], введем спинорно-векторные обозначения. Будем записывать столбец коэффициентов C_1, C_2 как спинор u :

$$u = \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}. \quad (2.134)$$

В первом из двух уравнений (2.128) выделим комбинации коэффициентов при $-iPk_j$, где $j = x, y, z$. Эти комбинации имеют вид:

$$v_{x\uparrow} = \frac{-C_3}{\sqrt{2}} + \frac{C_5}{\sqrt{6}} + \frac{C_8}{\sqrt{3}}, \quad v_{y\uparrow} = \frac{-iC_3}{\sqrt{2}} - \frac{iC_5}{\sqrt{6}} - \frac{iC_8}{\sqrt{3}}, \quad v_{z\uparrow} = \sqrt{\frac{2}{3}}C_4 + \frac{C_7}{\sqrt{3}}. \quad (2.135)$$

Во втором уравнении (2.128) аналогичным образом выделим комбинации

$$v_{x\downarrow} = \frac{-C_4}{\sqrt{6}} + \frac{C_6}{\sqrt{2}} + \frac{C_7}{\sqrt{3}}, \quad v_{y\downarrow} = \frac{-iC_4}{\sqrt{6}} - \frac{iC_6}{\sqrt{2}} + \frac{iC_7}{\sqrt{3}}, \quad v_{z\downarrow} = \sqrt{\frac{2}{3}}C_5 - \frac{C_8}{\sqrt{3}}. \quad (2.136)$$

Величины (2.135)–(2.136), как нетрудно проверить, являются коэффициентами разложения волновой функции (2.28) по базису (2.37),

$$|\psi_{\mathbf{k}}\rangle = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} C_1 S|\uparrow\rangle + e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} C_2 S|\downarrow\rangle + \sum_{j=x,y,z} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} v_{j\sigma} X_j |\sigma\rangle. \quad (2.137)$$

Они составляют шестикомпонентный вектор-спинор \mathbf{v} . С применением введенной таким образом векторно-спинорной символики пара уравнений (2.128) записывается в сжатой форме

$$(E - E_c)u = -iP\mathbf{k}\cdot\mathbf{v}, \quad (2.138)$$

а остальные уравнения системы (2.128)–(2.130) после алгебраических преобразований приводятся к виду [13]

$$(E - E_v + \Delta/3)\mathbf{v} = iP\mathbf{k}u + i(\Delta/3)[\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{v}]. \quad (2.139)$$

Два уравнения (2.132) и шесть соотношений (2.131) в спинорной форме принимают вид:

$$\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m(E)} + E_c - E \right) u = 0, \quad (2.140)$$

$$\mathbf{v} = \frac{i\hbar^2 \mathbf{k}}{2Pm(E)} u - \frac{P\Delta}{3(E - E_v)(E - E_v + \Delta)} [\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{k}] u, \quad (2.141)$$

где введено обозначение

$$\begin{aligned} \frac{1}{m(E)} &= \frac{2P^2}{3\hbar^2} \left(\frac{2}{E - E_v} + \frac{1}{E - E_v + \Delta} \right) = \\ &= \frac{2P^2}{3\hbar^2} \left(\frac{2}{E - E_c + E_g} + \frac{1}{E - E_c + E_g + \Delta} \right). \end{aligned} \quad (2.142)$$

Величина (2.142) при $E = E_c$ совпадает с обратной эффективной массой электрона на дне зоны проводимости, определяемой формулой (2.113), поэтому функцию $m(E)$ можно назвать эффективной массой, зависящей от энергии.

Двукратное крамерово вырождение ветвей энергетического спектра проявляется в том, что компоненты C_1 , C_2 спинора u удовлетворяют одинаковым уравнениям, содержащимся в (2.140) и в (2.132).

2.1.6. Гамильтониан Латтинжера

При изучении состояний валентной зоны с энергией $E \approx E_v$ часто основную роль играет факт вырождения ветвей Γ_8 легких и тяжелых дырок в точке Γ , а их непараболичность и присутствие отделенной щелью Δ зоны не актуальны. В этом случае разумно перейти от модели Кейна, описывающей сложную валентную зону одновременно с зоной проводимости, к другой модели, которая включает только ветви Γ_8 .

Эффективный kp -гамильтониан для зон Γ_8 , получаемый в базисе $|u_{30}\rangle, \dots, |u_{60}\rangle$ (2.66) как часть матрицы (2.84), запишется в виде:

$$\hat{H}_{\Gamma_8}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} F & H & I & 0 \\ H^* & G & 0 & I \\ I^* & 0 & G & -H \\ 0 & I^* & -H^* & F \end{pmatrix}, \quad (2.143)$$

где зависящие от волнового вектора \mathbf{k} функции F , G , H , I определяются тремя зонными параметрами A , B , D по формулам (2.87). Отметим, что здесь численные значения параметров должны отличаться от значений A , B , D в гамильтониане Кейна (2.84) для одного и того же материала.

Различие связано с тем, что в эффективном гамильтониане (2.33) для зон Γ_8 суммирование по β включает не только вклады далеких зон, но и вклад соседней зоны проводимости Γ_6 (причем, $\bar{E} = E_v$ – четырехкратно вырожденный уровень энергии потолка валентной зоны), тогда как в (2.84) взаимодействие валентных зон Γ_8 с ближайшей зоной Γ_6 учитывается посредством матричного элемента P (2.86) и не входит в другие параметры.

Матрица (2.143) называется *гамильтонианом Латтинжера*. Она может быть получена методом инвариантов в теории симметрии (без детального расчета элементов \mathbf{kp} -матрицы (2.33)) в форме, явно отражающей кубическую симметрию кристаллической решетки:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\Gamma_8}(\mathbf{k}) &= E_v \hat{1} + \frac{\hbar^2}{2m_0} \left[-(\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma_2)k^2 \hat{1} + 2\gamma_2(k_x^2 \hat{J}_x^2 + k_y^2 \hat{J}_y^2 + k_z^2 \hat{J}_z^2) + \right. \\ &\quad \left. + 2\gamma_3(k_x k_y \{\hat{J}_x, \hat{J}_y\} + k_x k_z \{\hat{J}_x, \hat{J}_z\} + k_y k_z \{\hat{J}_y, \hat{J}_z\}) \right] = \\ &= E_v \hat{1} + \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(-(\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma_2)\mathbf{k}^2 \hat{1} + 2\gamma_3(\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{J}})^2 + 2(\gamma_2 - \gamma_3)(k_x^2 \hat{J}_x^2 + k_y^2 \hat{J}_y^2 + k_z^2 \hat{J}_z^2) \right) \end{aligned} \quad (2.144)$$

Здесь $\hat{1}$ – единичная матрица 4×4 , $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$ – матрицы операторов проекций момента импульса для значения момента $J = 3/2$, известные из курса квантовой механики:

$$\hat{J}_x = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} & 0 & 0 \\ \sqrt{\frac{3}{2}} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} \\ 0 & 0 & \sqrt{\frac{3}{2}} & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{J}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i\sqrt{\frac{3}{2}} & 0 & 0 \\ i\sqrt{\frac{3}{2}} & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & -i\sqrt{\frac{3}{2}} \\ 0 & 0 & i\sqrt{\frac{3}{2}} & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{J}_z = \begin{pmatrix} \frac{3}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{3}{2} \end{pmatrix},$$

$$\{\hat{J}_i, \hat{J}_k\} \equiv \hat{J}_i \hat{J}_k + \hat{J}_k \hat{J}_i.$$

Безразмерные постоянные $\gamma_1, \gamma_2, \gamma_3$ в (2.144) называются параметрами Латтинжера; они связаны с зонными параметрами A, B, D в (2.143) равенствами

$$\frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_1 = A, \quad \frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_2 = \frac{B}{2}, \quad \frac{\hbar^2}{2m_0}\gamma_3 = \frac{D}{2\sqrt{3}}. \quad (2.145)$$

Секулярное уравнение в модели Латтинжера

$$\det [\hat{H}_{\Gamma_8}(\mathbf{k}) - E\hat{1}] = 0 \quad (2.146)$$

приводится к виду:

$$((F - E)(G - E) - |H|^2 - |I|^2)^2 = 0. \quad (2.147)$$

Это уравнение имеет два двукратно вырожденных корня; мы можем их интерпретировать как описание ветвей легких (lh) и тяжелых (hh) дырок:

$$E_{lh, hh} = \frac{F + G}{2} \mp \sqrt{\left(\frac{F - G}{2}\right)^2 + |H|^2 + |I|^2}.$$

С учетом формул (2.87) имеем:

$$E_{lh}(\mathbf{k}) = E_v - Ak^2 - \sqrt{B^2k^4 + C^2(k_x^2k_y^2 + k_y^2k_z^2 + k_z^2k_x^2)}, \quad (2.148)$$

$$E_{hh}(\mathbf{k}) = E_v - Ak^2 + \sqrt{B^2k^4 + C^2(k_x^2k_y^2 + k_y^2k_z^2 + k_z^2k_x^2)}, \quad (2.149)$$

где введено обозначение:

$$C^2 \equiv D^2 - 3B^2 = \frac{3\hbar^4}{m_0^2}(\gamma_3^2 - \gamma_2^2). \quad (2.150)$$

При $C \neq 0$ зоны легких и тяжелых дырок анизотропны, их изоэнергетические поверхности представляют собой «гофрированные»

сферы (рис. 2.7). Из выражений (2.148)–(2.149) видно, что энергия дырок в модели Латтинжера квадратично зависит от величины волнового вектора \mathbf{k} , но коэффициент пропорциональности при k^2 зависит от направления \mathbf{k} , если $C \neq 0$.

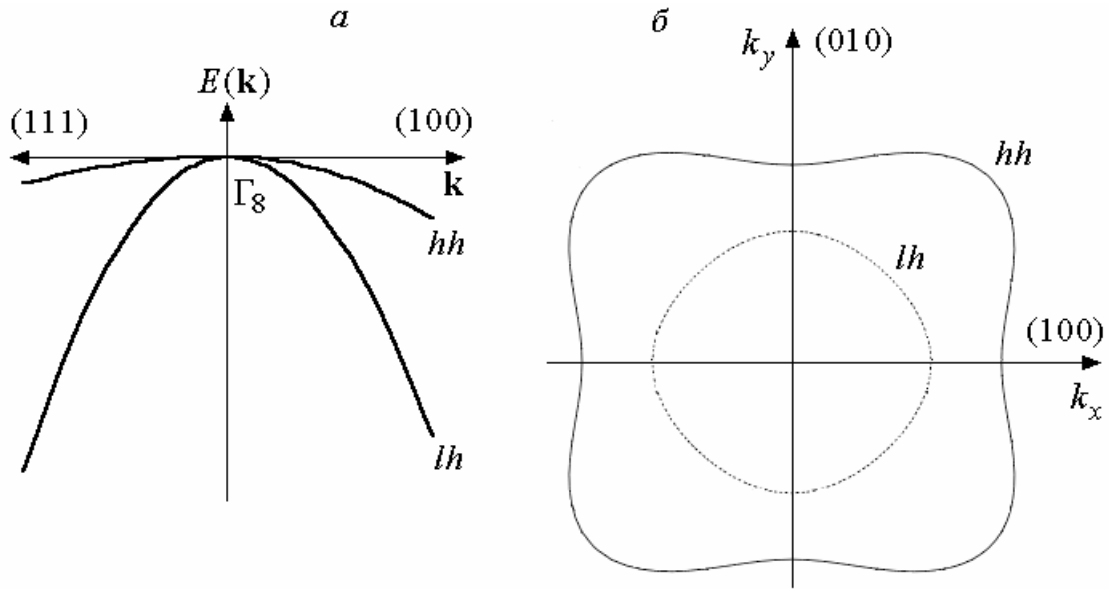


Рис. 2.7. Анизотропная модель Латтинжера.

a – анизотропный закон дисперсии валентных зон Γ_8 в модели Латтинжера.
б – линии постоянной энергии в плоскости $k_x, k_y, (k_z = 0)$.

Если значения параметров Латтинжера γ_2 и γ_3 близки, то отклонение формы изоэнергетических поверхностей от сферической невелико, и можно пользоваться изотропной моделью Латтинжера с $\gamma_3 = \gamma_2$:

$$\hat{H}(\mathbf{k}) = E_v - \frac{\hbar^2}{2m_0} \left(\left(\gamma_1 + \frac{5}{2}\gamma_2 \right) \mathbf{k}^2 \hat{1} - 2\gamma_2 (\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{J}})^2 \right). \quad (2.151)$$

В этом случае $D = \sqrt{3}B$, $C = 0$, и выражения (2.148)–(2.149) принимают вид

$$E_{lh}(\mathbf{k}) = E_v - (A + B)k^2, \quad (2.152)$$

$$E_{hh}(\mathbf{k}) = E_v - (A - B)k^2. \quad (2.153)$$

Эффективные массы легких и тяжелых дырок в (2.152)–(2.153) не зависят от направления волнового вектора и определяются равенствами:

$$\frac{\hbar^2}{2m_{lh}} = A + B = \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 + 2\gamma_2), \quad \frac{\hbar^2}{2m_{hh}} = A - B = \frac{\hbar^2}{2m_0}(\gamma_1 - 2\gamma_2). \quad (2.154)$$

Закон дисперсии (2.148)–(2.149) свойственен многим полупроводникам, которые обладают кубической симметрией с центром инверсии и имеют вырожденный экстремум валентной зоны в Γ -точке зоны Бриллюэна.

Поскольку модель Латтинжера не включает описания зоны проводимости, она применима к более широкому ряду материалов, чем модель Кейна. В качестве важного примера отметим, что рассмотренное здесь строение валентной зоны реализуется в кристаллах элементов IV группы Ge и Si с алмазоподобной решеткой (симметрия O_h , есть центр инверсии), имеющих различное строение зоны проводимости. В случае Ge экстремумы зоны проводимости находятся на границе зоны Бриллюэна в восьми эквивалентных L-точках, располагающихся на осях типа (111). В Si экстремумы зоны проводимости лежат в шести Δ -точках внутри зоны Бриллюэна на осях типа (100), (010), (001).

В пренебрежении спиновым расщеплением, связанным с отсутствием центра инверсии, модель Латтинжера применима также к кристаллам со структурой цинковой обманки (симметрия T_d). В качестве примера таких кристаллов мы уже упоминали полупроводниковые соединения III–V GaAs и InSb. Другой важный пример – бесщелевые полупроводники, такие как HgTe. В последнем случае значение одной из эффективных масс в (2.154) является отрицательным. При этом модель Латтинжера описывает картину соприкасающихся в точке $\mathbf{k} = 0$ двух зон с различной по знаку кривизной – зона проводимости в Γ -точке вырождена с валентной зоной; базисные функции обеих зон составляют единый мультиплет (квартет) с симметрией Γ_8 .

2.2. МЕТОД ОГИБАЮЩИХ ФУНКЦИЙ В ЗАДАЧАХ О РАЗМЕРНОМ КВАНТОВАНИИ ЭНЕРГИИ ЭЛЕКТРОНОВ В ГЕТЕРОСТРУКТУРАХ

В разделе 2.1 речь шла об электронном энергетическом спектре объемных (однородных) кристаллов. Теперь мы возвращаемся к рассмотрению гетероструктур.

Детальное описание гетерограниц требует предположений об их атомной структуре и в общем случае оказывается сложным. Для простоты ограничимся случаем резких гетеропереходов между слоями родственных материалов А и В, эффективные kp -гамильтонианы которых $\hat{H}^{(A)}(\mathbf{k})$ и $\hat{H}^{(B)}(\mathbf{k})$ совпадают по виду и отличаются друг от друга только значениями своих параметров. В число параметров входят края зон $E_{a,m}$, где a – номер ветви энергетического спектра, $m = A, B$ – «номер» материала. Края зон испытывают разрывы U_a на каждой границе между слоями:

$$U_a(\mathbf{r}) = \begin{cases} 0, & \mathbf{r} \in A \\ E_{a,B} - E_{a,A}, & \mathbf{r} \in B \end{cases} \quad (2.155)$$

Остальные параметры kp -гамильтониана (2.35) определяются энергетическими зазорами и значениями матричных элементов импульса. Поскольку различие в картине уровней $E_{a,m}$ и, следовательно, различие зазоров в материалах А и В принимается во внимание, то значения параметров (2.34) также следует считать изменяющимися от А к В, тогда как изменение матричных элементов импульса и самих базисных функций $|u_{a0}\rangle$ учитывать не обязательно.

Присутствие гетеропереходов нарушает трансляционную симметрию однородной кристаллической решетки, так что в общем случае волновая функция электрона $|\psi\rangle$ даже в однородных областях гетероструктуры не будет иметь вида волны Блоха (2.28) с определенным волновым вектором \mathbf{k} , а запишется в форме линейной комбинации таких волн. Другими словами, если считать базисные функции $|u_{a0}\rangle$ в материалах

А и В известными и одинаковыми, то волновую функцию стационарного состояния электрона следует искать в виде:

$$|\psi\rangle = \sum_{a=1}^N f_a(\mathbf{r}) |u_{a0}\rangle, \quad (2.156)$$

где неизвестные функции $f_a(\mathbf{r})$ зависят от координат в каждом слое и изменяются от слоя к слою. Функции $f_a(\mathbf{r})$ в (2.156) называются *огибающими* функциями; N – количество зон, учитываемых в выбранной *kp*-модели.

Для того чтобы найти уравнения, которым подчиняются огибающие функции, необходимо перейти от \mathbf{k} -представления к \mathbf{r} -представлению *kp*-модели (к координатному представлению), ввести в гамильтониан разрывы зон (2.155) и считать, что параметры гамильтониана (2.34) являются кусочно-постоянными функциями координат \mathbf{r} .

В теории подобный переход хорошо разработан только для тех задач, где неоднородность кристалла порождается возмущающим потенциалом $U(\mathbf{r})$, плавно зависящим от координат (так что его относительные изменения на межатомных расстояниях малы); подход к таким задачам известен как *метод эффективной массы* [3]. В этом методе при отсутствии магнитного или переменного электрического полей процедура перехода к координатному представлению сводится к замене компонент волнового вектора \mathbf{k} в матрице эффективного *kp*-гамильтониана компонентами дифференциального оператора $-i\nabla$, а также к добавлению диагональной матрицы с потенциалом $U(\mathbf{r})$ в качестве диагональных элементов. В результате, вместо алгебраической задачи «на собственные значения и собственные векторы» (2.31) возникает система дифференциальных уравнений для огибающих функций $f_a(\mathbf{r})$ электрона в плавном потенциале $U(\mathbf{r})$:

$$\sum_{b=1}^N \left(\hat{H}_{ab}^{eff} (-i\nabla) + \delta_{ab} U(\mathbf{r}) - \delta_{ab} E \right) f_b(\mathbf{r}) = 0. \quad (2.157)$$

Этот результат легко проиллюстрировать следующим образом. Вспомним, что элементы $H_{ab}^{eff}(\mathbf{k})$ матрицы $k\mathbf{p}$ -гамильтониана зависят от компонент волнового вектора \mathbf{k} по степенному закону. Если теперь ввести в рассмотрение операторы $\hat{H}_{ab}^{eff}(-i\nabla)$ простой заменой аргумента \mathbf{k} оператором $-i\nabla$, то с очевидностью будут выполняться тождества

$$\hat{H}_{ab}^{eff}(-i\nabla) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} = H_{ab}^{eff}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (2.158)$$

В частном примере с $U(\mathbf{r}) \equiv 0$ разумно искать огибающие функции $f_a(\mathbf{r})$ в виде плоских волн

$$f_a(\mathbf{r}) = C_a(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}. \quad (2.159)$$

В этом случае, с учетом (2.158), система дифференциальных уравнений (2.157) сводится как раз к знакомой нам системе алгебраических уравнений (2.31) для коэффициентов $C_a(\mathbf{k})$. Таким образом, в невозмущенной области кристалла частные решения системы уравнений (2.157) для огибающих функций могут быть выбраны в виде плоских волн (2.159) с коэффициентами $C_a(\mathbf{k})$, удовлетворяющими $k\mathbf{p}$ -уравнениям (2.31) однородного кристалла.

Приведем самый простой пример перехода от $k\mathbf{p}$ -модели к дифференциальным уравнениям (2.157). Пусть речь идет об однозонной (не считая двукратного вырождения по спину) модели зоны проводимости с изотропным параболическим законом дисперсии (2.24):

$$E_c(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}. \quad (2.160)$$

Поскольку $k\mathbf{p}$ -гамильтониан в однозонной модели – не что иное, как выражение (2.160), система (2.157) в этом примере сводится к единственному уравнению для одной огибающей функции $f(\mathbf{r})$:

$$\frac{\hbar^2 (-i\nabla)^2}{2m} f(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}) f(\mathbf{r}) = E f(\mathbf{r}). \quad (2.161)$$

Оно отличается по форме от обычного уравнения Шредингера для частицы в вакууме только тем, что здесь вместо массы частицы m_0 присутствует эффективная масса m ; поэтому и в многозонных моделях подход, основанный на решении системы (2.157) для огибающих функций, называют методом эффективной массы. Уравнение для огибающей функции (2.161) – это знакомое нам по задачам раздела 1 уравнение (1.3).

В области резкого гетероперехода метод эффективной массы теряет силу, но он остается применимым в толще однородных областей гетероструктуры. Так как роль возмущающего потенциала $U(\mathbf{r})$ в гетероструктуре играют разрывы зон $U_a(\mathbf{r})$ (2.155), естественно предположить, что огибающие функции определяются системой уравнений, по виду аналогичной уравнениям (2.157):

$$\sum_{b=1}^N \left(\hat{H}_{ab}^{eff} (-i\nabla) + \delta_{ab} U_b(\mathbf{r}) - \delta_{ab} E \right) f_b(\mathbf{r}) = 0. \quad (2.162)$$

С учетом явного выражения (2.35) для $H_{ab}^{eff}(\mathbf{k})$ система уравнений (2.162) запишется в виде:

$$\sum_{b=1}^N \hat{H}_{ab}(\mathbf{r}, -i\nabla) f_b(\mathbf{r}) = E f_a(\mathbf{r}), \quad a = 1, \dots, N, \quad (2.163)$$

где

$$\begin{aligned} \hat{H}_{ab}(\mathbf{r}, -i\nabla) = & \left(E_{a,A}(0) + U_a(\mathbf{r}) - \frac{\hbar^2}{2m_0} \nabla^2 \right) \delta_{ab} - \frac{i\hbar}{m_0} \boldsymbol{\pi}_{ab} \cdot \nabla - \\ & - \frac{\hbar^2}{2} \sum_{i,j=x,y,z} (M_{ab}^{-1}(\mathbf{r}))_{ij} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{\partial}{\partial x_j}. \end{aligned} \quad (2.164)$$

Если $U_a(\mathbf{r})$ и $(M_{ab}^{-1}(\mathbf{r}))_{ij}$ представляют собой кусочно-постоянные функции координат, то уравнения (2.163)–(2.164) следует решать отдельно для областей А и В, а затем надо сшивать решения на границах областей с помощью некоторых граничных условий.

Вопрос о выборе физически обоснованных граничных условий в этой задаче сложен; ему посвящена обширная литература (см., например, 168

статью [15] с множеством ссылок в ней). Ряд граничных условий и вид решений для различных типов наноструктур – квантовых ям, прямоугольных и цилиндрических квантовых нитей, прямоугольных и сферических квантовых точек – дан в книге Е.Л. Ивченко [5].

Далее в разделе 2 мы рассматриваем системы с плоскими параллельными границами между слоями. Если координатная ось z выбирается в направлении, перпендикулярном плоскостям, разделяющим слои А и В, а в направлениях, параллельных слоям, гетероструктура обладает трансляционной симметрией, то каждую из огибающих функций $f_a(\mathbf{r})$ следует искать в виде произведения двумерной плоской волны (одной и той же во всех слоях) и новой огибающей функции $\psi_a(z)$, изменяющейся от слоя к слою:

$$f_a(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}_{\parallel}} \psi_a(z), \quad (2.165)$$

где

$$\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}_{\parallel} = k_x x + k_y y, \quad (2.166)$$

\mathbf{K} и \mathbf{r}_{\parallel} – двухкомпонентные волновой вектор и радиус-вектор. Подстановка (2.165) в (2.163) ведет к системе уравнений для огибающих функций одномерного движения $\psi_a(z)$:

$$\sum_{b=1}^N \hat{H}_{ab}(z, \mathbf{K}, -i\frac{d}{dz}) \psi_b(z) = E \psi_a(z), \quad (2.167)$$

где

$$\begin{aligned} \hat{H}_{ab}(z, \mathbf{K}, -i\frac{d}{dz}) = & \left(E_{a,A}(0) + U_a(z) + \frac{\hbar^2 K^2}{2m_0} - \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d^2}{dz^2} \right) \delta_{ab} + \\ & + \frac{\hbar}{m_0} \mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\pi}_{ab} - \frac{i\hbar}{m_0} (\boldsymbol{\pi}_{ab})_z \frac{d}{dz} + \frac{\hbar^2}{2} \sum_{i,j=x,y} (M_{ab}^{-1}(z))_{ij} K_i K_j - \\ & - \frac{\hbar^2}{2} \frac{d}{dz} (M_{ab}^{-1}(z))_{zz} \frac{d}{dz} - \frac{i\hbar^2}{2} \sum_{i=x,y} \left(K_i (M_{ab}^{-1}(z))_{iz} \frac{d}{dz} + K_i \frac{d}{dz} (M_{ab}^{-1}(z))_{zi} \right). \end{aligned} \quad (2.168)$$

Отметим, что здесь параметры $(M^{-1}_{ab}(z))_{ij}$ внесены под знак производной по z аналогично тому, как это было сделано с эффективной массой при переходе от уравнения (1.28) к уравнению (1.29).

Наиболее простой выбор граничных условий подсказывается формальными соображениями, аналогичными приведенным в разделе 1.2.2. Те огибающие функции $\psi_a(z)$, которые входят в уравнения (2.167)–(2.168) со своей второй производной, необходимо подчинить условию непрерывности:

$$\psi_a|_A = \psi_a|_B. \quad (2.169)$$

Это относится ко всем N огибающим $\psi_a(z)$, если в модели (2.168) не отбрасываются члены $\delta_{ab}(\hbar^2/(2m_0))d^2/dz^2$. Тогда первая производная любой из огибающих $\psi_a(z)$ будет конечной величиной, не обязательно непрерывной. Проинтегрируем члены каждого из уравнений (2.167) по z в малой окрестности гетерограницы $\Delta z = 2\varepsilon$ и перейдем к пределу с $\varepsilon \rightarrow 0$. Интегралы от конечных величин обратятся в этом пределе в ноль. Вклад могут дать только те члены, которые в (2.167) имеют вид производной от величины, способной испытывать скачок. В результате, получим граничные условия для производных огибающих функций, которые, следуя Бастарду [6], можно записать в виде:

$$\sum_{b=1}^N \hat{A}_{ab} \psi_b|_A = \sum_{b=1}^N \hat{A}_{ab} \psi_b|_B, \quad a = 1, \dots, N, \quad (2.170)$$

где

$$\hat{A}_{ab} = \frac{-i\hbar}{m_0}(\pi_{ab})_z - \delta_{ab} \frac{\hbar^2}{2m_0} \frac{d}{dz} - \frac{\hbar^2}{2} (M^{-1}_{ab}(z))_{zz} \frac{d}{dz} - \frac{i\hbar^2}{2} \sum_{i=x,y} K_i (M^{-1}_{ab}(z))_{zi}. \quad (2.171)$$

Граничные условия для производных огибающих функций можно ввести другим способом, если определить матричный «оператор скорости» частицы с многозонным энергетическим спектром,

$$(\hat{V}_{ab})_z = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \hat{H}_{ab}}{\partial(-id/dz)}, \quad (2.172)$$

и принять условия непрерывности следующего вида [5]:

$$\sum_{b=1}^N (\hat{V}_{ab})_z \psi_b|_A = \sum_{b=1}^N (\hat{V}_{ab})_z \psi_b|_B, \quad a=1, \dots, N. \quad (2.173)$$

В ряде моделей условия (2.170) и (2.173) оказываются эквивалентными. Действительно, основное различие между операторами (2.171) и (2.172) заключается в том, что в последнем из них относительный вклад членов с $(\pi_{ab})_z$ вдвое меньше, чем в первом, но эти члены можно вообще вычеркнуть, если огибающие функции в соответствии с (2.169) непрерывны, а значения кейновских параметров $(\pi_{ab})_z$ одинаковы в материалах А и В. В этом случае $2i\hat{A}_{ab} = \hbar(\hat{V}_{ab})_z$, так что граничные условия (2.170) и (2.173) совпадают. Если же считать, что параметры $(\pi_{ab})_z$ для материалов А и В различаются, то в операторах (2.168) члены с $(\pi_{ab})_z d/dz$ следует записать в симметризованной форме

$$-\frac{i\hbar}{m_0} \frac{1}{2} \left((\pi_{ab})_z \frac{d}{dz} + \frac{d}{dz} (\pi_{ab})_z \right). \quad (2.174)$$

Тогда при интегрировании уравнений (2.167) в окрестности гетерограницы с учетом непрерывности огибающих функций вклад в граничные условия даст лишь второе операторное слагаемое из (2.174), и поэтому в матрице (2.171) члены с $(\pi_{ab})_z$ приобретут дополнительный множитель 1/2. В этом случае также $2i\hat{A}_{ab} = \hbar(\hat{V}_{ab})_z$, то есть условия (2.170) и (2.173) налагают одни и те же ограничения на огибающие функции.

Наряду с перечисленными граничными условиями, которые определяются формой уравнений метода огибающих (2.167), имеются требования, связанные с физическим характером интересующих нас электронных состояний. Так, в сверхрешетке с периодом a_{SL} (вдоль оси z)

каждая из огибающих функций $\psi_a(z)$ должна удовлетворять теореме Блоха:

$$\psi_a(z + a_{SL}) = e^{iq_z a_{SL}} \psi_a(z), \quad (2.175)$$

где $\hbar q_z$ – z -составляющая квазиимпульса электрона в сверхрешетке.

При рассмотрении связанных состояний в квантовой яме на все огибающие функции налагается условие

$$\psi_a(z) \rightarrow 0 \quad \text{при } |z| \rightarrow \infty, \quad (2.176)$$

требующее асимптотического убывания волновой функции в толще потенциальных барьеров.

2.3. РАЗМЕРНОЕ КВАНТОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННЫХ СОСТОЯНИЙ С УЧЕТОМ КЕЙНОВСКОЙ НЕПАРАБОЛИЧНОСТИ

Выше мы рассмотрели общие черты подхода к размерному квантованию в рамках $\mathbf{k}p$ -моделей электронного энергетического спектра. В остальной части раздела 2 разбираются отдельные примеры, иллюстрирующие особенности конкретных моделей.

2.3.1. Уравнения для огибающих функций в модели Кейна

Начнем с модели Кейна 8×8 без квадратичных по волновому вектору \mathbf{k} членов. В случае однородного кристалла она описывается уравнениями (2.128)–(2.130), или, в спинорной форме, – уравнениями (2.138)–(2.139). Переходя к методу огибающих, заменим \mathbf{k} оператором $-i\nabla$, а коэффициенты $C_a(\mathbf{k})$ – огибающими функциями $f_a(\mathbf{r})$. Тогда система уравнений (2.138)–(2.139) примет вид [13] (∇ – оператор, Δ – энергия спин-орбитального расщепления):

$$(E - E_c)u = -P\nabla \cdot \mathbf{v}, \quad (2.177)$$

$$(E - E_v + \Delta/3)\mathbf{v} = P\nabla u + i(\Delta/3)[\boldsymbol{\sigma} \times \mathbf{v}]. \quad (2.178)$$

Рассмотрим, например, квантовую яму с плоскопараллельными границами между материалами А и В. Как и в разделе 1, будем считать, что А – узкозонный полупроводник (область квантовой ямы), В – широкозонный (область потенциальных барьеров). Если ось z выбрана в направлении, перпендикулярном интерфейсам квантовой ямы, то решения следует искать в виде

$$f_a(\mathbf{r}) = e^{ik_x x + ik_y y} \psi_a(z), \quad (2.179)$$

где k_x, k_y – компоненты волнового вектора \mathbf{K} в плоскости квантовой ямы, $\psi_a(z)$ – огибающие волновые функции одномерного движения вдоль z . Подставив в (2.177)–(2.178) спиноры u и v с компонентами, выраженными через (2.179), получим систему уравнений для функций $\psi_a(z)$; эта же система уравнений возникает при замене в (2.128)–(2.130) $C_a(\mathbf{k})$ функциями $\psi_a(z)$, а k_z – оператором $(-id/dz)$:

$$\begin{cases} (E_c - E)\psi_1 + \frac{iPk_+}{\sqrt{2}}\psi_3 - \sqrt{\frac{2}{3}}P \frac{d}{dz}\psi_4 - \frac{iPk_-}{\sqrt{6}}\psi_5 - \frac{P}{\sqrt{3}} \frac{d}{dz}\psi_7 - \frac{iPk_-}{\sqrt{3}}\psi_8 = 0 \\ (E_c - E)\psi_2 + \frac{iPk_+}{\sqrt{6}}\psi_4 - \sqrt{\frac{2}{3}}P \frac{d}{dz}\psi_5 - \frac{iPk_-}{\sqrt{2}}\psi_6 - \frac{iPk_+}{\sqrt{3}}\psi_7 + \frac{P}{\sqrt{3}} \frac{d}{dz}\psi_8 = 0 \end{cases}, \quad (2.180)$$

$$\begin{cases} (E_v - E)\psi_3 - \frac{iPk_-}{\sqrt{2}}\psi_1 = 0 \\ (E_v - E)\psi_4 + \sqrt{\frac{2}{3}}P \frac{d}{dz}\psi_1 - \frac{iPk_-}{\sqrt{6}}\psi_2 = 0 \\ (E_v - E)\psi_5 + \frac{iPk_+}{\sqrt{6}}\psi_1 + \sqrt{\frac{2}{3}}P \frac{d}{dz}\psi_2 = 0 \\ (E_v - E)\psi_6 + \frac{iPk_+}{\sqrt{2}}\psi_2 = 0 \end{cases}, \quad (2.181)$$

$$\begin{cases} (E_v - \Delta - E)\psi_7 + \frac{P}{\sqrt{3}} \frac{d}{dz}\psi_1 + \frac{iPk_-}{\sqrt{3}}\psi_2 = 0 \\ (E_v - \Delta - E)\psi_8 + \frac{iPk_+}{\sqrt{3}}\psi_1 - \frac{P}{\sqrt{3}} \frac{d}{dz}\psi_2 = 0 \end{cases}. \quad (2.182)$$

Уравнения (2.180)–(2.182) относятся к базису (2.66) с направлением квантования момента импульса вдоль оси z . Будем считать, что значение параметра P одинаково в материалах А и В, тогда как Δ , E_c и $E_v = E_c - E_g$ – кусочно-постоянные функции координаты z ; их значения скачком изменяются на границах квантовой ямы $z = 0$ и $z = d$.

Для выбора граничных условий воспользуемся рекомендациями из раздела 2.2 и проинтегрируем уравнения для огибающих в окрестности какой-либо гетерограницы. Из уравнений (2.181)–(2.182) следуют только два граничных условия – требование непрерывности функций ψ_1 и ψ_2 ,

$$\psi_1|_A = \psi_1|_B, \quad \psi_2|_A = \psi_2|_B, \quad (2.183)$$

а из уравнений (2.180) мы получим два условия непрерывности для линейных комбинаций функций ψ_4, ψ_7 и ψ_5, ψ_8 :

$$(\sqrt{2}\psi_4 + \psi_7)|_A = (\sqrt{2}\psi_4 + \psi_7)|_B, \quad (2.184)$$

$$(\sqrt{2}\psi_5 - \psi_8)|_A = (\sqrt{2}\psi_5 - \psi_8)|_B. \quad (2.185)$$

Заметим, что линейные комбинации (2.184)–(2.185) можно выразить с помощью уравнений (2.181)–(2.182) через функции ψ_1, ψ_2 и их производные:

$$\sqrt{2}\psi_4 + \psi_7 = \frac{\sqrt{3}\hbar^2}{2P} \frac{1}{m(E)} \frac{d\psi_1}{dz} + k_- \frac{iP}{\sqrt{3}} \left(\frac{1}{E - E_v + \Delta} - \frac{1}{E - E_v} \right) \psi_2, \quad (2.186)$$

$$\sqrt{2}\psi_5 - \psi_8 = \frac{\sqrt{3}\hbar^2}{2P} \frac{1}{m(E)} \frac{d\psi_2}{dz} - k_+ \frac{iP}{\sqrt{3}} \left(\frac{1}{E - E_v + \Delta} - \frac{1}{E - E_v} \right) \psi_1, \quad (2.187)$$

где $m(E)$ – зависящая от энергии масса, определенная формулой (2.142), $k_{\pm} = k_x \pm ik_y$. Отсюда видно, что при $k_x = k_y = 0$ условия непрерывности (2.184)–(2.185) можно записать как условия для производных функций ψ_1, ψ_2 в форме, аналогичной (1.31):

$$\frac{1}{m(E)} \frac{d\psi_1}{dz} \Big|_A = \frac{1}{m(E)} \frac{d\psi_1}{dz} \Big|_B, \quad \frac{1}{m(E)} \frac{d\psi_2}{dz} \Big|_A = \frac{1}{m(E)} \frac{d\psi_2}{dz} \Big|_B. \quad (2.188)$$

В то же время и сами дифференциальные уравнения первого порядка (2.180) в области постоянства параметров сводятся с помощью (2.181)–(2.182) к двум одинаковым уравнениям второго порядка для каждой из функций ψ_1 и ψ_2 по отдельности:

$$-\frac{\hbar^2}{2m(E)} \frac{d^2\psi_a}{dz^2} + E_c \psi_a = E \psi_a, \quad a = 1, 2. \quad (2.189)$$

Уравнение (2.189) по форме совпадает с уравнением Шредингера (1.28) при $K = 0$, отличаясь от него только тем, что здесь эффективная масса $m(E)$, согласно (2.142), обладает зависимостью от энергии E (наряду с зависимостью от параметров материала P , E_c , E_g , Δ):

$$\frac{1}{m(E)} = \frac{2P^2}{3\hbar^2} \left(\frac{2}{E - E_c + E_g} + \frac{1}{E - E_c + E_g + \Delta} \right). \quad (2.190)$$

Следовательно, решая уравнение (2.189), например, с номером $a = 1$ отдельно в областях А и В, а затем подчиняя волновую функцию ψ_1 граничным условиям (2.183) и (2.188), мы получим для определения уровней размерного квантования $E_n(K=0)$ в симметричной квантовой яме шириной d уравнение, аналогичное (1.46):

$$\left(\frac{1}{\beta(E)} - \beta(E) \right) \sin(k_A(E)d) + 2 \cos(k_A(E)d) = 0, \quad (2.191)$$

где

$$\beta(E) = \frac{k_A(E) m_B(E)}{\gamma_B(E) m_A(E)}, \quad (2.192)$$

$$\begin{aligned}
k_A(E) &= \sqrt{\frac{2m_A(E)}{\hbar^2} (E - E_{c,A})} = \\
&= \sqrt{\frac{1}{P^2} \frac{(E - E_{v,A})(E - E_{v,A} + \Delta_A)(E - E_{c,A})}{(E - E_{v,A} + 2\Delta_A/3)}}, \quad (2.193)
\end{aligned}$$

$$\gamma_B(E) = \sqrt{\frac{2m_B(E)}{\hbar^2} (E_{c,B} - E)} = -ik_B(E). \quad (2.194)$$

Индексы А и В указывают, что значения параметров E_c , E_g , Δ в выражениях (2.190)–(2.194) берутся для материала А или В, соответственно.

Основное отличие уравнения (2.191) от изученного в разделе 1 уравнения размерного квантования (1.46) для однозонной модели с параболическим спектром энергии заключается в том, что за счет зависимости массы $m(E)$ от энергии E в уравнении (2.191) учитывается кейновская непараболичность трех ветвей электронного спектра энергии: el , lh , so (рис. 2.3–2.4). При $E_{c,A} < E < W_{el}$ это уравнение дает уровни размерного квантования в зоне проводимости, при $E_{v,A} - W_{lh} < E < E_{v,A}$ – в зоне легких дырок, при $E_{v,A} - \Delta_A - W_{so} < E < E_{v,A} - \Delta_A$ – в спин-орбитально отщепленной зоне дырок, где W_{el} , W_{lh} , W_{so} – высоты энергетических барьеров на границах соответствующих квантовых ям; численный пример приведен в разделе 2.3.3. Модель Кейна 8×8 (2.180)–(2.182) включает также волновые функции тяжелых дырок (hh), но она не дает физически корректного описания их энергетического спектра, так как в этой модели эффективная масса тяжелых дырок бесконечна.

2.3.2. Метод матрицы переноса в многозонной модели

Уравнение (2.191) теряет силу при $K \neq 0$, поэтому для определения закона дисперсии $E(K)$ в подзонах размерного квантования следует найти дисперсионное уравнение (ДУ), исходя из граничных условий (2.183)–(2.185). Основное достоинство модели Кейна с минимальным количеством параметров состоит в возможности получения и исследования ДУ в аналитической форме. Однако для простоты мы ограничимся ниже

численными примерами и поэтому опишем здесь метод расчета $E(K)$, ориентированный на применение в компьютерной программе без вывода ДУ в явном виде. Этот метод является обобщением введенного в разделе 1.5 однозонного метода матрицы переноса на случай многозонных энергетических спектров; его можно применять не только к модели Кейна.

Расчет подзон $E(K)$ удобно представить последовательностью шагов. На первом шаге надо выписать все линейно независимые частные решения уравнений для огибающих $\psi_a(z)$ в объемной задаче, относящейся к однородному слою гетероструктуры с произвольным номером n . Обычно такие частные решения имеют вид:

$$\hat{C}_{n,t}(k_{n,t}, \mathbf{K}) \exp(ik_{n,t}z), \quad \hat{C}_{n,t}(-k_{n,t}, \mathbf{K}) \exp(-ik_{n,t}z), \quad (2.195)$$

где индекс t нумерует различные типы решений $k_{n,t}^2(E, \mathbf{K})$ объемного секулярного уравнения с заданным волновым вектором \mathbf{K} в плоскости n -го слоя. В индекс t входит и номер s , с помощью которого перечисляются решения с вырожденными по спину значениями $k_{n,t}^2$. Функция $k_{n,t}$ в (2.195) есть взятый с положительным знаком корень квадратный из $k_{n,t}^2$; по смыслу это проекция $k_z(E)$ волнового вектора на ось z , перпендикулярную плоскости слоя, для ветви энергетического спектра данного типа. \hat{C} – столбец величин $C_a(k_z, \mathbf{K})$, являющийся собственным вектором k -гамильтониана в слое n для собственного значения $k_z(E)$.

На втором шаге следует построить общее решение $\hat{\psi}_n(z)$ в слое n . В рассматриваемом случае оно имеет вид линейной суперпозиции частных решений (2.195) с произвольными коэффициентами $A_{n,t}$ и $B_{n,t}$:

$$\hat{\psi}_n(z) = \sum_t (A_{n,t} \hat{C}_{n,t}(k_{n,t}, \mathbf{K}) e^{ik_{n,t}z} + B_{n,t} \hat{C}_{n,t}(-k_{n,t}, \mathbf{K}) e^{-ik_{n,t}z}). \quad (2.196)$$

Формула (2.196) необходима нам для того, чтобы подчинить общие решения $\hat{\psi}_n(z_n)$ и $\hat{\psi}_{n+1}(z_n)$ для соседних слоев граничным условиям в каждой граничной точке $z = z_n$ (см. (2.169)–(2.173) или (2.183)–(2.185)),

которые связывают $A_{n,t}$, $B_{n,t}$ с $A_{n+1,t}$ и $B_{n+1,t}$ линейными соотношениями. С этой целью введем в дело вектор-столбцы $v_n(z)$ вида

$$v_n(z) = \begin{pmatrix} a_{n,1}(z) \\ a_{n,2}(z) \\ \dots \\ b_{n,1}(z) \\ b_{n,2}(z) \\ \dots \end{pmatrix}, \quad \text{где } a_{n,t}(z) = A_{n,t} e^{ik_{n,t}z}, \quad b_{n,t}(z) = B_{n,t} e^{-ik_{n,t}z}. \quad (2.197)$$

Количество M компонентов в столбце $v_n(z)$ равно удвоенному количеству значений индекса t , то есть оно равно количеству частных решений (2.195). Граничные условия в точке $z = z_n$ образуют совокупность независимых равенств, которые следует представить в виде

$$\hat{L}_n v_n(z_n) = \hat{L}_{n+1} v_{n+1}(z_n), \quad (2.198)$$

где \hat{L}_n (как и \hat{L}_{n+1}) – некоторая матрица $M \times M$. Задача данного шага заключается в определении каждого элемента матрицы \hat{L}_n в явной форме путем просмотра всех имеющихся граничных условий и выделения среди них линейно независимых равенств. Отметим, что любую строку в равенствах (2.198) можно умножать на произвольную величину (отличную от нуля), приводя матрицу \hat{L}_n к наиболее удобному виду.

Материалы А и В часто представляют собой твердые растворы двух соединений, скажем, C^1 и C^2 , так что, например, А есть C^1 , В есть $C^1_{1-X}C^2_X$. В этом случае параметры материалов могут быть заданы в виде функций непрерывной переменной X . Так, при линейной интерполяции параметров между значениями, относящимися к C^1 и C^2 , имеем:

$$E_g(X) = E_{g,1}(1-X) + E_{g,2}X, \quad \Delta(X) = \Delta_1(1-X) + \Delta_2X. \quad (2.199)$$

Если уровень дна зоны проводимости в области квантовой ямы принять за начало отсчета энергии E (так что $E_{c,A} = 0$) и воспользоваться известными из литературы данными о зависимости разрыва зоны проводимости $W_{el}(X)$ от состава, то параметр E_c в (2.190) также запишется в форме заданной функции переменной X :

$$E_c(X) = W_{el}(X). \quad (2.200)$$

Кейновский параметр P в (2.190) мы считаем, для простоты, не зависящим от X ; он определяется формулой (2.113) с взятым из опыта значением эффективной массы электрона m на дне квантовой ямы в зоне проводимости.

Таким образом, пользуясь описанием параметров материала в форме явных функций переменной состава X , можно для всех слоев определить единую матрицу-функцию $\hat{L}(X)$; тогда в (2.198)

$$\hat{L}_n = \hat{L}(X_n), \quad \hat{L}_{n+1} = \hat{L}(X_{n+1}). \quad (2.201)$$

Из (2.198) следует, что

$$v_n(z_n) = \hat{t}^{(n,n+1)} v_{n+1}(z_n), \quad (2.202)$$

где

$$\hat{t}^{(n,n+1)} = \hat{L}_n^{-1} \hat{L}_{n+1}. \quad (2.203)$$

Дальнейшие шаги аналогичны построениям, рассмотренным в разделе (1.5.1). Введем диагональную матрицу $\hat{t}^{(n,n)}$ размером $M \times M$; ее первые $M/2$ диагональных элементов по определению имеют вид

$$e^{-ik_{n,1}(z_n - z_{n-1})}, \quad e^{-ik_{n,2}(z_n - z_{n-1})}, \quad \dots, \quad (2.204, a)$$

а в остальных диагональных элементах изменен знак показателя экспоненты:

$$e^{ik_{n,1}(z_n - z_{n-1})}, \quad e^{ik_{n,2}(z_n - z_{n-1})}, \quad \dots. \quad (2.204, б)$$

Квантовой яме $B \setminus A \setminus B$, как трехслойной гетероструктуре, сопоставляется матрица переноса в форме произведения трех t -матриц:

$$\hat{T} = \hat{t}^{(1,2)} \hat{t}^{(2,2)} \hat{t}^{(2,3)}. \quad (2.205)$$

Она устанавливает линейную связь между волновыми функциями в левом и правом слоях B , окружающих слой A :

$$v_1(z_1) = \hat{T} v_3(z_2). \quad (2.206)$$

В задаче о размерно-квантованных состояниях волновые функции должны убывать в глубине крайних слоев, поэтому мы требуем, чтобы вектор-столбцы (2.197) для этих слоев имели следующий вид:

$$v_1(z_1) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \dots \\ b_{1,1}(z_1) \\ b_{1,2}(z_1) \\ \dots \end{pmatrix}, \quad v_3(z_2) = \begin{pmatrix} a_{3,1}(z_2) \\ a_{3,2}(z_2) \\ \dots \\ 0 \\ 0 \\ \dots \end{pmatrix}. \quad (2.207)$$

С учетом (2.206) это требование можно записать как систему однородных линейных уравнений для неизвестных $a_{3,t}$ с коэффициентами $S_{tt'} = T_{tt'}$, $t, t' = 1, \dots, M/2$:

$$\begin{pmatrix} \hat{S} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{3,1} \\ a_{3,2} \\ \dots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \dots \end{pmatrix}. \quad (2.208)$$

Матрица \hat{S} в (2.208) представляет собой субматрицу матрицы переноса (2.205) – верхний левый блок в \hat{T} размером $M/2 \times M/2$. Для того чтобы система однородных линейных уравнений имела решение, отличное от

нулевого, необходимо приравнять нулю определитель, составленный из коэффициентов при неизвестных:

$$\det \hat{S} = 0. \quad (2.209)$$

Это и есть искомое дисперсионное уравнение для подзон размерного квантования.

Отметим, что после ввода в компьютерную программу явных выражений для элементов матриц (2.201) и (2.204), как функций переменных $E, K, X, d = z_2 - z_1$, все шаги по вычислению (2.203), (2.205), а также численное решение ДУ (2.209) можно «поручить» стандартным подпрограммам используемого математического пакета. При этом, конечно, следует учитывать, что автоматизация вычислений еще не является гарантией корректности результата; например, известно, что в моделях Кейна с k^2 -членами могут обнаруживаться нефизические решения (spurious solutions, см. [15] и указанную там литературу, а также см. рис. 2.6 в разделе 2.1.5).

2.3.3. Влияние непараболичности на подзоны квантовой ямы

Разберем конкретный пример расчета уровней размерного квантования для симметричной квантовой ямы $V \setminus V$ с учетом непараболичности электронных зон в рассмотренной выше изотропной модели Кейна. В этой модели объемный закон дисперсии, как нам уже известно, следует из уравнения (2.140) и дается формулой

$$k^2(E) = \frac{1}{P^2} \frac{(E - E_c)(E - E_v)(E - E_v + \Delta)}{(E - E_v + 2\Delta/3)} \equiv \frac{2m(E)}{\hbar^2} (E - E_c). \quad (2.210)$$

Без учета двукратного крамерсова вырождения мы имеем здесь всего один «тип» функции $k^2(E)$, а с учетом этого вырождения – две одинаковых функции $k^2(E)$; для нумерации указанных двух типов частных решений введем спиновый индекс $s = 1, 2$.

Для гетероструктуры с осью z , перпендикулярной слоям, модель Кейна сохраняет изотропию в плоскости x, y . Следовательно, без потери общности можно положить:

$$k_y = 0, \quad k_x = K, \quad \text{так что } k_{\pm} = K. \quad (2.211)$$

Квадрат волнового вектора в (2.210) равен $k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$, поэтому, принимая во внимание (2.211), имеем:

$$k_z(E, K, X) = \sqrt{\frac{2m(E, X)}{\hbar^2} (E - E_c(X)) - K^2}. \quad (2.212)$$

Эта функция будет играть роль $k_{n,t}$ в выражениях для частных решений (2.195). В соответствии с (2.199)–(2.200) здесь вместо номера слоя n введена переменная X . Выражения для столбцов $\hat{C}_{s=1,2}(k_z, K)$ следуют из (2.131); решение с номером $s = 1$ мы получим, выбрав в (2.131), например, $C_1 = 1, C_2 = 0$, а решение с $s = 2$ найдем, полагая $C_1 = 0, C_2 = 1$:

	$s = 1$	$s = 2$
C_1	1	0
C_2	0	1
C_3	$\frac{-iP}{\sqrt{2}} \frac{K}{(E - E_c + E_g)}$	0
C_4	$\frac{iP}{\sqrt{6}} \frac{2k_z}{(E - E_c + E_g)}$	$\frac{iP}{\sqrt{6}} \frac{-K}{(E - E_c + E_g)}$
C_5	$\frac{iP}{\sqrt{6}} \frac{K}{(E - E_c + E_g)}$	$\frac{iP}{\sqrt{6}} \frac{2k_z}{(E - E_c + E_g)}$
C_6	0	$\frac{iP}{\sqrt{2}} \frac{K}{(E - E_c + E_g)}$
C_7	$\frac{iP}{\sqrt{3}} \frac{k_z}{(E - E_c + E_g + \Delta)}$	$\frac{iP}{\sqrt{3}} \frac{K}{(E - E_c + E_g + \Delta)}$
C_8	$\frac{iP}{\sqrt{3}} \frac{K}{(E - E_c + E_g + \Delta)}$	$\frac{iP}{\sqrt{3}} \frac{-k_z}{(E - E_c + E_g + \Delta)}$

(2.213)

Здесь k_z есть функция вида (2.212), параметры E_c, E_g, Δ задаются в форме функций переменной состава X . Общее решение (2.196) для слоя с составом X в нашем примере имеет вид

$$\hat{\psi}(z, X) = \sum_{s=1,2} (A_{X,s} \hat{C}_s(k_z, K) e^{ik_z z} + B_{X,s} \hat{C}_s(-k_z, K) e^{-ik_z z}), \quad (2.214)$$

где столбцы $\hat{C}_{s=1,2}(k_z, K)$ с компонентами $C_{a=1, \dots, 8}$ берутся из (2.213).

Теперь следует найти матрицу $\hat{L}(E, K, X)$ в равенствах (2.198), выражающих граничные условия:

$$\hat{L}(X_n) v(X_n, z_n) = \hat{L}(X_{n+1}) v(X_{n+1}, z_n), \quad \text{где} \quad v(X, z) = \begin{pmatrix} A_{X,1} e^{ik_z z} \\ A_{X,2} e^{ik_z z} \\ B_{X,1} e^{-ik_z z} \\ B_{X,2} e^{-ik_z z} \end{pmatrix}.$$

Для этой цели достаточно просматривать левую сторону граничных условий (2.183)–(2.185), сравнивая ее с $\hat{L}(X_n) v(X_n, z_n)$. Так, левая сторона первого из условий непрерывности (2.183), применяемого к элементу ψ_a с номером $a = 1$ столбца (2.214), с учетом первой строки в (2.213) имеет вид:

$$A_{X,s=1} e^{ik_z z} \cdot 1 + B_{X,s=1} e^{-ik_z z} \cdot 1 + A_{X,s=2} e^{ik_z z} \cdot 0 + B_{X,s=2} e^{-ik_z z} \cdot 0 = \dots$$

Считая это выражение первой строкой в $\hat{L}(X) v(X, z)$, находим элементы первой строки матрицы $\hat{L}(E, K, X)$:

$$L_{11} = L_{13} = 1, \quad L_{12} = L_{14} = 0. \quad (2.215, a)$$

Аналогичным образом второе условие непрерывности (2.183) позволяет найти элементы второй строки матрицы $\hat{L}(E, K, X)$,

$$L_{21} = L_{23} = 0, \quad L_{22} = L_{24} = 1, \quad (2.215, б)$$

а условия непрерывности линейных комбинаций (2.184) и (2.185) дают, соответственно, третью и четвертую строки матрицы $\hat{L}(E, K, X)$:

$$L_{31} = (\sqrt{2}C_4 + C_7)_{s=1} = \frac{iP}{\sqrt{3}} \left(\frac{2}{E - E_c + E_g} + \frac{1}{E - E_c + E_g + \Delta} \right) k_z,$$

$$L_{32} = (\sqrt{2}C_4 + C_7)_{s=2} = \frac{iP}{\sqrt{3}} \left(\frac{-1}{E - E_c + E_g} + \frac{1}{E - E_c + E_g + \Delta} \right) K,$$

$$L_{33} = -L_{31}, \quad L_{34} = L_{32}, \quad (2.215, \text{в})$$

$$L_{41} = -L_{32}, \quad L_{42} = L_{31}, \quad L_{43} = -L_{32}, \quad L_{44} = -L_{31}. \quad (2.215, \text{г})$$

Остальные шаги расчета подзон размерного квантования $E(K)$ выполняются по формулам (2.203)–(2.209) с t -матрицами размером 4×4 и S -матрицей 2×2 . При $K = 0$ этот метод дает те же значения уровней размерного квантования E_n , что и простое уравнение (2.191). Численные результаты приведены на рис. 2.8–2.9 (а также на рис. 2.11 в разделе 2.3.4).

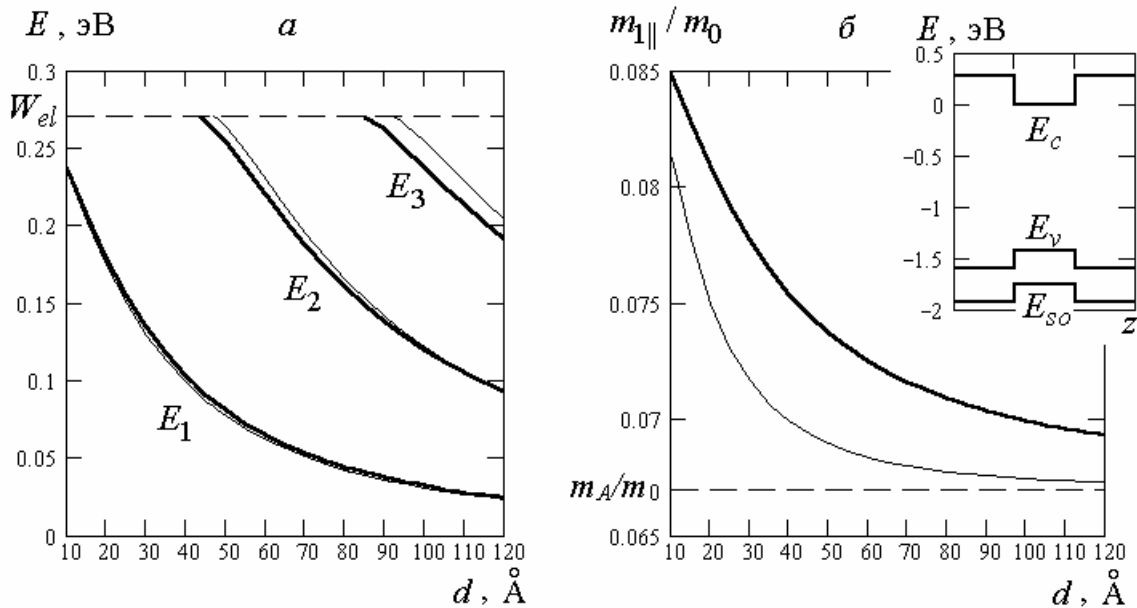


Рис. 2.8. Влияние непараболичности на электронные подзоны квантовой ямы. *а* – размерно-квантованные уровни энергии $E_n(K=0)$ электронов в симметричной квантовой яме в зоне проводимости как функции ширины ямы d ; тонкие линии – для однозонной параболической модели, жирные линии – для модели Кейна 8×8 без квадратичных \mathbf{k} -членов. *б* – зависимость параллельной эффективной массы электрона вблизи дна нижней подзоны от ширины квантовой ямы, определенная из параболической аппроксимации (1.56) численных данных для $E_1(K)$; тонкая линия – в однозонной параболической модели с ДУ (1.46), жирная линия – в модели Кейна с ДУ (2.209) на основе (2.215), пунктир – объемное значение эффективной массы электрона в области ямы. На вставке показана

энергетическая диаграмма рассмотренной гетероструктуры. Параметры материалов задавались по формулам (с энергией в эВ): $E_g(X) = 1,427 + 1,247 X$, $\Delta(X) = 0,3 X + 0,341 (1 - X)$, $E_c(X) = W_{el}(X) = 0,6 (E_g(X) - E_g(0))$, $m(0)/m_0 = 0,067$. В области ямы $X = 0$, в области барьеров $X = 0,36$. Эффективные массы для параболической однозонной модели здесь и на рис. 2.9 определялись по формулам (2.113)–(2.114), а значения высоты энергетических барьеров выбраны те же, что и в расчете по модели Кейна с $X = 0,36$: $W_{el} = 0,27$ эВ, $W_{lh} = 0,18$ эВ, $W_{so} = 0,165$ эВ. Приведенные в пособии расчеты носят иллюстративный характер и не претендуют на точное описание конкретных материалов; выбранные здесь параметры приблизительно соответствуют $\text{Al}_x\text{Ga}_{1-x}\text{As}$.

Видно, что в этом примере учет непараболичности зоны проводимости практически не влияет на положение самого нижнего уровня (E_1), но приводит к небольшому снижению уровней E_2, E_3 . Величина параллельной массы $m_{1\parallel}/m_0$ вследствие непараболичности заметно возрастает.

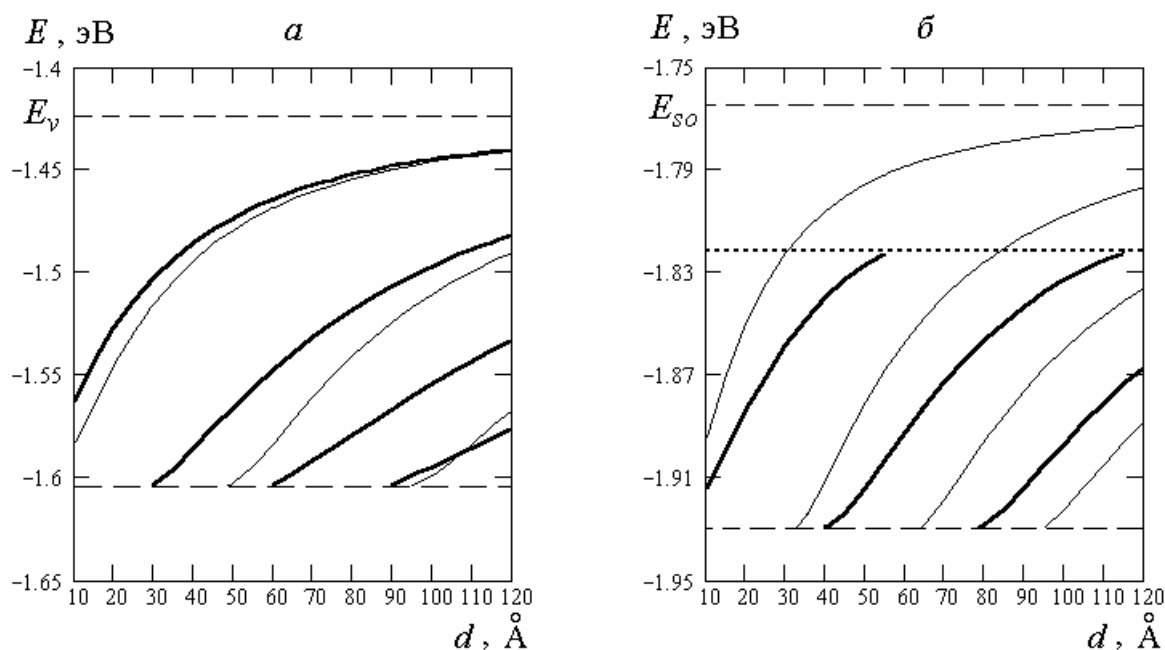


Рис. 2.9. Дырочные уровни квантовой ямы в модели Кейна.

a – размерно-квантованные уровни энергии $E_n(K=0)$ в зоне легких дырок (lh); *б* – уровни $E_n(K=0)$ в отщепленной валентной зоне (so). Тонкие линии – однозонная параболическая модель, жирные линии – модель Кейна с теми же параметрами, что и для данных на рис. 2.8. Пунктирной линией отмечено значение энергии $E_v(X) - 2\Delta(X)/3$ при $X = 0,36$. Штриховые линии указывают положение потолка валентной зоны в квантовой яме и уровень энергетического барьера для дырок.

Как видно из графиков, приведенных на рис. 2.9, *a*, в рассматриваемом примере непараболичность зоны легких дырок заметно изменяет картину размерно-квантованных уровней энергии. То же относится и к уровням в отщепленной зоне дырок (рис. 2.9, *б*), однако этот результат обесценивается не имеющей физического смысла особенностью модельного закона дисперсии (2.210) при $E = E_v - 2\Delta/3$. Особенность (обращение в нуль знаменателя в (2.210)) приводит к тому, что при $E_{v,B} - 2\Delta_B/3 < E < E_{so,A}$ волновой вектор *so*-дырки в слоях материала В оказывается действительным, и размерно-квантованные состояния исчезают – в интервале энергии $E_{v,B} - 2\Delta_B/3 < E < E_{so,A}$ нет решений с убывающими в глубь барьеров волновыми функциями.

2.3.4. Пограничные состояния в модели Кейна

Одно из своеобразных свойств модели Кейна без квадратичных по волновому вектору членов заключается в присутствии пограничных состояний дырок, локализованных на резком гетеропереходе. Эти состояния, называемые также интерфейсными или поверхностными (surface states), применительно к модели Кейна были аналитически обнаружены и исследованы в [13, 14]. Ниже приводится численная иллюстрация свойств указанных пограничных состояний.

Отличительный признак поверхностных состояний, локализованных на плоской границе (например, с координатой $z = 0$), – экспоненциальное убывание их волновых функций по обе стороны от этой граничной поверхности. Другими словами, поверхностное состояние характеризуется чисто мнимой *z*-компонентой волнового вектора $k_z(E, K, X)$ как в слое В ($X \neq 0$), так и в граничащем с ним слое А ($X = 0$). Обратная величина мнимой части *z*-компоненты волнового вектора, $(\text{Im } k_z)^{-1}$, дает оценку длины локализации пограничного состояния вдоль оси *z*. Эта длина должна значительно превышать период решетки *a* ($a \sim a_B \sim 1 \text{ \AA}$), чтобы пограничное состояние допускало описание в рамках метода эффективной массы. В плоскости *x, y* движение дырки, пребывающей в пограничном состоянии, остается свободным – оно характеризуется действительным двумерным волновым вектором *K* и энергией $E(K)$.

Для того чтобы узнать, существуют ли пограничные состояния в рассматриваемой модели гетероперехода, мы можем применить метод (2.206)–(2.209) к одиночному гетеропереходу $B \setminus A$ (с границей при $z = z_1$). В нашей компьютерной программе уже определена матрица $\hat{t}^{(1,2)}$ размера 4×4 , с помощью которой вычислялась T -матрица гетероструктуры $B \setminus A \setminus B$ (2.205). В случае одиночного гетероперехода рассматриваются только два четырехкомпонентных v -столбца (2.197). Их связывает матрица $\hat{t}^{(1,2)}$,

$$v_1(z_1) = \hat{t}^{(1,2)} v_2(z_1), \quad (2.216)$$

причем в задаче о пограничных состояниях эти столбцы должны иметь вид, аналогичный (2.207): у столбца v_1 равны нулю два первых элемента, а у столбца v_2 – два последних. Такое условие эквивалентно системе однородных линейных уравнений:

$$\begin{pmatrix} \hat{S}^{B \setminus A} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{2,1}(z_1) \\ a_{2,2}(z_1) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.217)$$

где

$$\begin{pmatrix} \hat{S}^{B \setminus A} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_{11}^{(1,2)} & t_{12}^{(1,2)} \\ t_{21}^{(1,2)} & t_{22}^{(1,2)} \end{pmatrix}. \quad (2.218)$$

Характеристическое уравнение системы (2.217),

$$\det \hat{S}^{B \setminus A} = 0, \quad (2.219)$$

является уравнением для энергии $E(K)$ пограничных состояний.

В зоне проводимости гетероперехода ($E > E_{c,A}$) уравнение (2.219) не имеет корней, тогда как в валентной зоне ($E < E_{v,A}$) корни обнаруживаются, что свидетельствует о существовании пограничных состояний дырок в данной модели. Их свойства иллюстрирует рис. 2.10.

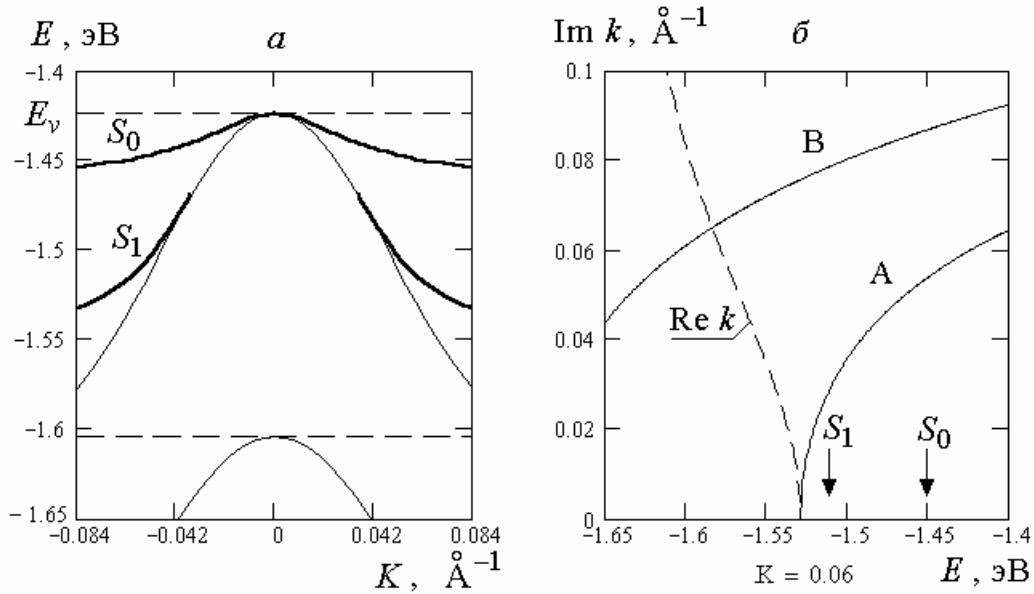


Рис. 2.10. Пограничные состояния дырок в модели Кейна
вблизи одиночного гетероперехода.

a – жирными линиями изображены ветви энергетического спектра $E(K)$ пограничных состояний в валентной зоне одиночного гетероперехода, найденные в модели Кейна без k^2 -членов; параметры материалов такие же, как для данных на рис. 2.8. Энергетическую диаграмму рассмотренного здесь гетероперехода В\А можно представить себе как левую половину диаграммы, показанной на вставке в рисунок 2.8, b ; такие же результаты получаются и для правого гетероперехода, А\В. Решения уравнения (2.219) образуют две ветви пограничных состояний, S_0 и S_1 . Ветвь S_0 начинается в точке $K = 0$, а ветвь S_1 появляется, начиная с ненулевого значения волнового вектора K . Верхняя тонкая линия изображает нули волнового вектора $k_{z,A}(E, K)$ на плоскости E, K ; выше этой линии значения $k_{z,A}(E, K)$ являются чисто мнимыми, а ниже – действительными. Аналогично, выше другой тонкой линии чисто мнимым является волновой вектор $k_{z,B}(E, K)$. Штриховые линии указывают положение потолка валентной зоны в слоях А и В. b – характер зависимости z -компоненты волнового вектора от энергии в слоях А и В при частном значении K , равном 0,06 в единицах Å^{-1} . Из этого рисунка видно, что в рассмотренном интервале энергии длина локализации пограничных состояний заметно превышает атомный масштаб длины $a_B \sim 1 \text{Å}$.

Вернемся к рассмотрению квантовой ямы В\А\В. Результаты расчета плоскостного закона дисперсии $E(K)$ дырок и электронов (изложенным выше методом (2.203)–(2.209) с L -матрицей (2.215)) для квантовой ямы шириной $d = 120 \text{Å}$ приведены на рис. 2.11.

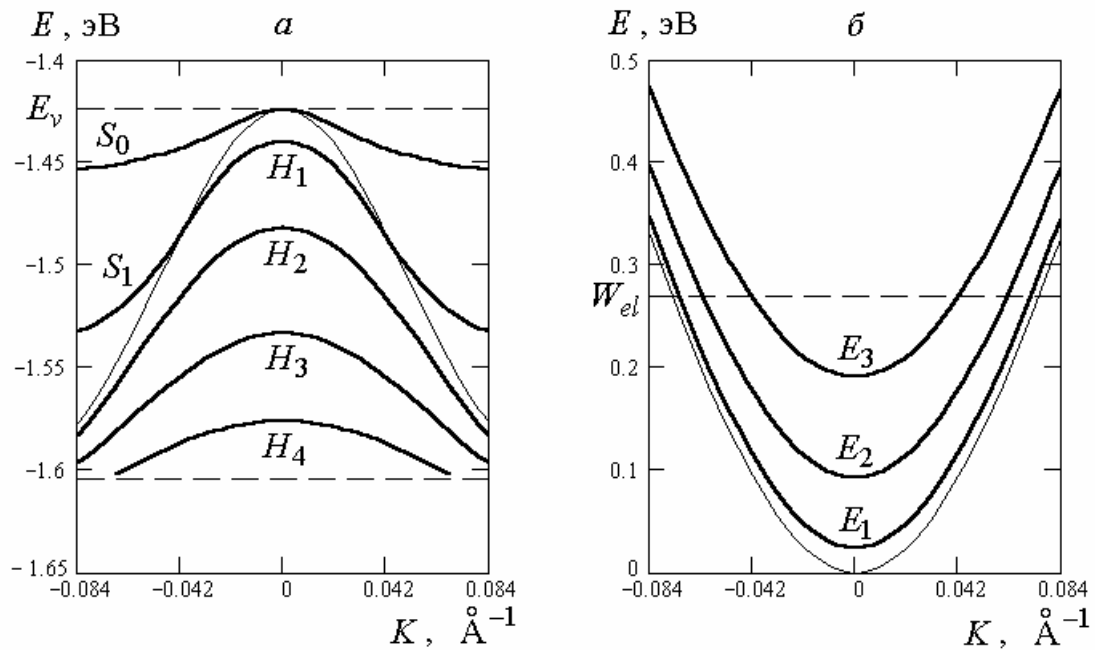


Рис. 2.11. Подзоны размерного квантования в модели Кейна.

a – жирными линиями показаны подзоны размерного квантования энергии дырок $E_n(K)$ (обозначены как H_1 – H_4) и пограничных состояний (S_0 и S_1) в квантовой яме В\A\В шириной $d = 120 \text{ \AA}$. Тонкая линия отделяет область пограничных состояний от области обычных размерно-квантованных состояний на плоскости E, K ; выше этой линии значения $k_{z,A}(E, K)$ (а также $k_{z,B}(E, K)$) являются чисто мнимыми. b – жирными линиями показаны подзоны размерного квантования в зоне проводимости. В области выше тонкой линии волновой вектор $k_{z,A}(E, K)$ действителен, так что поверхностных состояний здесь нет. Расчеты выполнены в рамках модели Кейна 8×8 без \mathbf{k}^2 -членов, с теми же параметрами материалов, что и для рис. 2.8–2.10.

Видно, что в кейновской квантовой яме энергетический спектр дырок содержит практически такие же ветви пограничных состояний S_0 и S_1 , как и в случае одиночного гетероперехода, причем ветвь S_1 является продолжением подзоны H_1 в область мнимых значений z -компоненты волнового вектора.

Поскольку в однозонной модели энергетического спектра дырок пограничных состояний нет (если эффективные массы дырок в материалах А и В имеют один и тот же знак), возникает вопрос – с чем связано появление пограничных состояний в модели Кейна? Аналитическое рассмотрение в [13, 14] показывает, что наряду с предположением о резкости гетероперехода важную роль для появления пограничных

состояний указанного типа играет бесконечная величина эффективной массы тяжелых дырок. В более реалистичных моделях, с конечной массой тяжелых дырок, обусловленной включением k^2 -членов в kp -гамильтониан, пограничные состояния становятся квазистационарными и не появляются в качестве решений дисперсионного уравнения с действительной энергией $E(K)$. Однако они могут участвовать в формировании зависимости $E_n(K)$ для действительных подзон размерного квантования вместе с эффектом «трансформации» (взаимопревращения) легких и тяжелых дырок, который ответственен также за нестационарность пограничных состояний. В результате, картина ветвей $E_n(K)$ приобретает довольно сложный вид. Ниже рассматривается пример подобной картины, полученной численным расчетом в трехзонной модели Кейна – с зонами e_l , lh и с параболической зоной hh , без учета спин-орбитально отщепленной зоны дырок.

2.3.5. Размерно-квантованные состояния дырок в трехзонной модели Кейна

Пусть матрица kp -гамильтониана имеет вид (2.119). В этом случае собственные значения энергии в объемной задаче образуют три зонные ветви: $E_{e_l}(k)$, $E_{lh}(k)$, $E_{hh}(k)$ (см. (2.121)–(2.125), рис. 2.5). Двукратное вырождение по спину здесь не учитывается, так как kp -гамильтониан (2.119) размером 3×3 получен из гамильтониана (2.117) размером 6×6 как раз выделением одного из двух наборов базисных состояний, отвечающих крамерсову вырождению энергетического спектра.

Решив секулярное уравнение объемной задачи (2.120) относительно $k^2(E)$, получим два «типа» решений; мы присвоим им номера $t = 1$ и $t = 2$:

$$t = 1: \quad k^2(E) = \frac{(E - E_c)^2 + (E - E_c)E_g}{2P^2/3 - (A + B)(E - E_c)}, \quad (2.220)$$

$$t = 2: \quad k^2(E) = \frac{E_c - E_g - E}{A - B} \equiv \frac{2m_{hh}}{\hbar^2}(E_c - E_g - E). \quad (2.221)$$

Следуя [16], запишем собственные векторы матрицы (2.119) в виде:

$$t=1: \begin{pmatrix} (\sqrt{6}/iP)(E - E_c + E_g + (A+B)k^2) \\ k_+ \\ -\sqrt{3}k_- \end{pmatrix}, \quad t=2: \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{3}k_+ \\ k_- \end{pmatrix}. \quad (2.222)$$

Эти выражения относятся к базису $|u_{10}\rangle$, $|u_{50}\rangle$, $|u_{30}\rangle$ (2.66) с направлением квантования момента импульса вдоль оси z . Поскольку матрица гамильтониана (2.119) получена в результате выбора $k_z=0$ (см. (2.116)), мы не можем полагать, как раньше, что ось z направлена вдоль нормали к слоям гетероструктуры. Поэтому направим по нормали к слоям ось x . Тогда в рамках модели Кейна гетероструктура остается изотропной в плоскости z, y , и без потери общности можно считать, что:

$$k_y = K, \quad k^2 = k_x^2 + K^2, \quad k_z = 0, \quad (2.223)$$

где K – волновой вектор в плоскости слоев.

Чтобы получить уравнения для огибающих функций $\psi_a(x)$ одномерного движения, заменим в гамильтониане (2.119) величину k_x оператором $-i\partial/dx$, а огибающие $f_a(\mathbf{r})$ будем искать в форме

$$f_a(\mathbf{r}) = e^{ik_z z + ik_y y} \psi_a(x) = e^{iKy} \psi_a(x). \quad (2.224)$$

Тем самым система уравнений метода огибающих (2.163) в рассматриваемой kp -модели для каждого однородного слоя гетероструктуры приводится к виду:

$$\begin{cases} (E_c - E)\psi_1 + \frac{-iP}{\sqrt{6}}(\hat{k}_x - iK)\psi_5 + \frac{iP}{\sqrt{2}}(\hat{k}_x + iK)\psi_3 = 0 \\ \frac{iP}{\sqrt{6}}(\hat{k}_x + iK)\psi_1 + \left(E_v - E - (A - \frac{B}{2})(\hat{k}_x^2 + K^2) \right)\psi_5 + \frac{\sqrt{3}B}{2}(\hat{k}_x^2 + 2i\hat{k}_x K - K^2)\psi_3 = 0 \\ \frac{-iP}{\sqrt{2}}(\hat{k}_x - iK)\psi_1 + \frac{\sqrt{3}B}{2}(\hat{k}_x^2 - 2i\hat{k}_x K - K^2)\psi_5 + \left(E_v - E - (A + \frac{B}{2})(\hat{k}_x^2 + K^2) \right)\psi_3 = 0 \end{cases} \quad (2.225)$$

В этих уравнениях $\hat{k}_x = -id/dx$; параметры A , B , E_c , и $E_v = E_c - E_g$ – кусочно-постоянные функции координаты x , которые можно задать, как функции переменной состава X . Для простоты считаем, что кейновский параметр P и масса тяжелых дырок (2.122) не зависят от состава слоев.

Частные решения системы уравнений (2.225) имеют вид

$$\hat{C}_{t=1}(k_1, K)e^{ik_1x}, \quad \hat{C}_{t=1}(-k_1, K)e^{-ik_1x}, \quad \hat{C}_{t=2}(k_2, K)e^{ik_2x}, \quad \hat{C}_{t=2}(-k_2, K)e^{-ik_2x},$$

где, с учетом выражений (2.220)–(2.223),

$$k_1(E, K, X) = k_{x, light}(E, K, X) = \sqrt{\frac{(E - E_c)^2 + (E - E_c)E_g}{2P^2/3 - (A + B)(E - E_c)} - K^2}, \quad (2.226)$$

$$k_2(E, K, X) = k_{x, heavy}(E, K, X) = \sqrt{\frac{2m_h\hbar}{\hbar^2}(E_c - E_g - E) - K^2}, \quad (2.227)$$

$\hat{C}_t(k_t, K)$	$t = 1$	$t = 2$
C_1	$\frac{\sqrt{6}}{iP}(E - E_c + E_g + (A + B)(k_1^2 + K^2))$	0
C_5	$k_1 + iK$	$\sqrt{3}(k_2 + iK)$
C_3	$-\sqrt{3}(k_1 - iK)$	$k_2 - iK$

(2.228)

Общее решение для слоя с составом X имеет вид:

$$\hat{\psi}(x, X) = \sum_{t=1,2} (A_{X,t} \hat{C}_t(k_t, K) e^{ik_t x} + B_{X,t} \hat{C}_t(-k_t, K) e^{-ik_t x}). \quad (2.229)$$

Члены с номером $t = 1$ описывают вклад легких частиц, то есть – электронов при $E > E_c$ или легких дырок при $E < E_v$, а члены с номером $t = 2$ представляют вклад тяжелых дырок.

Выберем граничные условия способом, указанным в [16]. Поскольку уравнения (2.225) содержат вторые производные функций ψ_5 и ψ_3 , подчиним эти функции условию непрерывности:

$$\psi_3|_A = \psi_3|_B, \quad \psi_5|_A = \psi_5|_B. \quad (2.230)$$

Кроме того, проинтегрируем уравнения (2.225) в окрестности гетерограницы, перед этим заменив в них операторные члены следующим образом

$$(A \pm B/2)(\hat{k}_x^2 + K^2) \rightarrow (\hat{k}_x \mp iK)(A \pm B/2)(\hat{k}_x \pm iK),$$

$$B(\hat{k}_x^2 \pm 2i\hat{k}_x K - K^2) \rightarrow (\hat{k}_x \pm iK)B(\hat{k}_x \pm iK). \quad (2.231)$$

Тогда, устремив размер окрестности к нулю, получим еще два условия непрерывности, которые кратко запишутся в виде

$$\left(\frac{P}{\sqrt{6}} \psi_1 + i(A - \frac{B}{2})(\hat{k}_x - iK)\psi_5 - i\frac{\sqrt{3}B}{2}(\hat{k}_x + iK)\psi_3 \right) \Big|_B^A = 0, \quad (2.232)$$

$$\left(\frac{-P}{\sqrt{2}} \psi_1 - i\frac{\sqrt{3}B}{2}(\hat{k}_x - iK)\psi_5 + i(A + \frac{B}{2})(\hat{k}_x + iK)\psi_5 \right) \Big|_B^A = 0. \quad (2.233)$$

Следующий шаг – определение матрицы $\hat{L}(E, K, X)$ в равенствах (2.198), выражающих граничные условия в терминах ν -столбцов с компонентами

$$A_{X,1} e^{ik_1 x}, \quad A_{X,2} e^{ik_2 x}, \quad B_{X,1} e^{-ik_1 x}, \quad B_{X,2} e^{-ik_2 x}.$$

Применяя граничные условия (2.230) и (2.232)–(2.233) к трехкомпонентной волновой функции (2.229), можно получить следующие выражения для элементов матрицы $\hat{L}(E, K, X)$:

$$\begin{aligned}
L_{11} &= k_1 + iK, & L_{12} &= \sqrt{3}(k_2 + iK), & L_{13} &= -k_1 + iK, & L_{14} &= \sqrt{3}(-k_2 + iK), \\
L_{21} &= \sqrt{3}(-k_1 + iK), & L_{22} &= k_2 - iK, & L_{23} &= \sqrt{3}(k_1 + iK), & L_{24} &= -k_2 - iK \\
L_{31} &= E_c - E_g - E, & L_{32} &= \sqrt{3}L_{31}, & L_{33} &= L_{31}, & L_{34} &= L_{32} \\
L_{41} &= -\sqrt{3}L_{31}, & L_{42} &= L_{31}, & L_{43} &= L_{41}, & L_{44} &= L_{42}.
\end{aligned}
\tag{2.234}$$

Дальнейшие шаги расчета подзон размерного квантования $E(K)$ в квантовой яме В\А\В мы выполняем по формулам (2.203)–(2.209) с t -матрицами размером 4×4 и S -матрицей 2×2 .

Результат численного решения дисперсионного уравнения (2.209) при частном выборе параметров симметричной квантовой ямы приведен на рис. 2.12, а. Для сравнения на рис. 2.12, б показаны результаты расчета плоскостного закона дисперсии $E(K)$, проведенного отдельно для легких и тяжелых дырок с помощью дисперсионного уравнения однозонной модели (1.46) при тех же значениях эффективных масс дырок и высоты энергетического барьера.

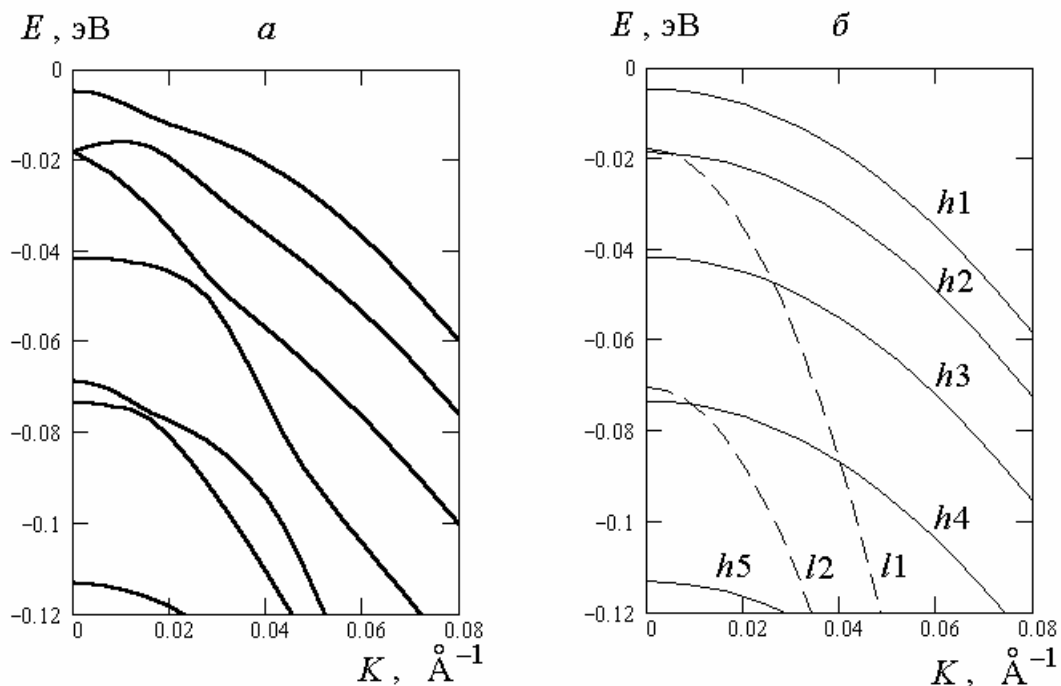


Рис. 2.12. Размерное квантование энергии дырок в трехзонной модели Кейна.

a – подзоны размерного квантования энергии дырок $E_n(K)$ в квантовой яме В\А\В шириной $d = 120 \text{ \AA}$ с высотой энергетических барьеров $W_{lh} = W_{hh} = 0,18 \text{ эВ}$, найденные в трехзонной модели Кейна (el, lh, hh) с

параболической зоной hh , без учета so -зоны ($\Delta \rightarrow \infty$). Начало отсчета энергии выбрано на уровне края валентной зоны в слое А. Дисперсионные кривые $E_n(K)$ симметричны к изменению знака волнового вектора $k_y = K$ и поэтому они изображены только в области $K > 0$. δ – результат расчета в однозонной модели подзон легких дырок ($l1, l2$) и тяжелых дырок ($h1-h5$) для такой же квантовой ямы. Параметры материалов задавались по формулам (с энергией в эВ): $E_g(X) = 1,427 + 1,247 X$, $E_c(X) = 0,6 (E_g(X) - E_g(0))$, $m / m_0 = 0,067$, $m_{hh} / m_0 = 0,45$, $(m_{lh} / m_0)^{-1} = 11,5 (1-X) + 4,8 X$. В области ямы $X = 0$, в области барьеров $X = 0,36$. Отметим, что при таком выборе параметров подзоны $l1$ и $h2$ почти вырождены в точке $K = 0$; это вырождение – случайное (не связанное с симметрией).

Для энергетического спектра дырок, показанного на рис. 2.12, *а*, характерно антипересечение ветвей – взаимное отталкивание уровней энергии в окрестности тех точек на плоскости E, K , где без учета взаимодействия легких и тяжелых дырок эти уровни должны пересекаться (см. рис. 2.12, *б*). Наблюдается также значительное изменение кривизны ветвей вблизи точки $K = 0$. В следующем разделе мы увидим, что указанные особенности сопровождаются эффектом трансформации легких и тяжелых дырок; этот эффект можно изучить в рамках модели Латтинжера, не вовлекая в расчет состояния зоны проводимости.

В области энергий выше края зоны проводимости ($E > E_{c,A}$) уравнения (2.203)–(2.209) с матрицей (2.234), в принципе, позволяют найти электронные размерно-квантованные подзоны $E_n(K)$, аналогичные подзонам, показанным на рис. 2.11, *б*. Однако при относительно большой ширине квантовой ямы d такой расчет осложняется непомерным ростом экспоненциальных функций (2.204), включающих мнимый волновой вектор k_2 тяжелых дырок.

2.4. ТРАНСФОРМАЦИЯ ЛЕГКИХ И ТЯЖЕЛЫХ ДЫРОК

2.4.1. Прямоугольная бесконечная яма в модели Латтинжера

Обратимся к одной из самых простых постановок задачи, допускающих аналитический вывод дисперсионного уравнения в модели со сложной валентной зоной. Следуя [17], рассмотрим энергетический спектр дырок в одиночной пленке полупроводника, у которого валентная

зона имеет симметрию Γ_8 и с достаточной точностью описывается изотропным гамильтонианом Латтинжера (2.151). Будем считать, что пленка представляет для дырок бесконечно глубокую потенциальную яму с прямоугольным рельефом, и примем условие обращения в нуль огибающих функций на границах пленки:

$$\psi_a(z=0) = 0, \quad \psi_a(z=d) = 0. \quad (2.235)$$

Здесь ось z выбрана вдоль нормали к пленке, d – ширина квантовой ямы, номер a принимает значения 3, 4, 5, 6 в соответствии с нумерацией базисных состояний Γ_8 в списке (2.66).

В рамках этой модели пленка изотропна в плоскости x, y , поэтому можно без ущерба положить

$$k_x = K, \quad k_y = 0. \quad (2.236)$$

Изотропный гамильтониан Латтинжера (2.151) в эквивалентной форме представляется матрицей (2.143) с элементами (2.87) при условии $D = \sqrt{3}B$. С учетом выбора $k_x = K, k_y = 0, E_v = 0$ указанная матрица имеет вид

$$\hat{H}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} F & H & I & 0 \\ H & G & 0 & I \\ I & 0 & G & -H \\ 0 & I & -H & F \end{pmatrix}, \quad (2.237)$$

где

$$\left. \begin{aligned} F &= -(A + \frac{B}{2})K^2 - (A - B)k_z^2, \\ G &= -(A - \frac{B}{2})K^2 - (A + B)k_z^2, \\ H &= \sqrt{3}BKk_z, \\ I &= (\sqrt{3}B/2)K^2. \end{aligned} \right\} \quad (2.238)$$

Параметры A и B могут быть выражены через эффективные массы легких и тяжелых дырок в объемном кристалле:

$$A + B = \hbar^2 / 2m_{lh}, \quad A - B = \hbar^2 / 2m_{hh}. \quad (2.239)$$

Заменив в (2.237)–(2.238), как обычно, k_z оператором $\hat{k}_z = -id / dz$, получим систему дифференциальных уравнений для огибающих функций $\psi_a(z)$:

$$\hat{H}(K, -id / dz) \hat{\psi}(z) = E \hat{\psi}(z). \quad (2.240)$$

Ее частные решения ищем в виде плоских волн

$$\hat{\psi}(z) = \hat{C}(k_z, K) e^{ik_z z}. \quad (2.241)$$

Подставив (2.241) в (2.240), имеем систему однородных алгебраических уравнений для коэффициентов $C_a(k_z, K)$:

$$\hat{H}(\mathbf{k}) \hat{C} = E \hat{C}, \quad (2.242)$$

то есть

$$\begin{aligned} (F - E)C_3 + H C_4 + I C_5 &= 0, \\ H C_3 + (G - E)C_4 + I C_6 &= 0, \\ I C_3 + (G - E)C_5 - H C_6 &= 0, \\ I C_4 - H C_5 + (F - E)C_6 &= 0, \end{aligned} \quad (2.243)$$

с функциями F, G, H, I , перечисленными в (2.238). Секулярное уравнение этой системы имеет вид (2.147); его корни относительно E даются формулами (2.152)–(2.153), они описывают двукратно вырожденные по спину изотропные зоны тяжелых и легких дырок в объемном кристалле:

$$E_{hh}(\mathbf{k}) = -\frac{\hbar^2(K^2 + k_z^2)}{2m_{hh}}, \quad E_{lh}(\mathbf{k}) = -\frac{\hbar^2(K^2 + k_z^2)}{2m_{lh}}. \quad (2.244)$$

Сначала решим задачу о размерном квантовании энергии дырок при нормальном (перпендикулярном) отражении дырок от поверхностей пленки, то есть – при $K = 0$. В этом случае $H = I = 0$, и система

дифференциальных уравнений (2.240) сводится к двум независимым уравнениям Шредингера вида (1.9) для волновых функций легких и тяжелых дырок:

$$-\frac{\hbar^2}{2m_{lh}} \frac{d^2 \psi_a(z)}{dz^2} = -E \psi_a(z), \quad a = 4, 5; \quad -\frac{\hbar^2}{2m_{hh}} \frac{d^2 \psi_a(z)}{dz^2} = -E \psi_a(z), \quad a = 3, 6.$$

Таким образом, можно воспользоваться уже известным решением задачи об уровнях энергии частицы в бесконечной прямоугольной яме (1.17) и сразу выписать выражения для размерно-квантованных уровней энергии легких и тяжелых дырок:

$$E_{t,n} \Big|_{K=0} = -\frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_t d^2} n^2, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.245)$$

Здесь введен индекс $t = hh, lh$, позволяющий отличать друг от друга уровни легких и тяжелых дырок, причем для краткости не указано спиновое квантовое число $s = 1, 2$, по которому уровни энергии (2.245) двукратно вырождены. У решений $\hat{\psi}_{t,s,n}(z)$, удовлетворяющих граничным условиям (2.235), зависимость от координаты z должна иметь вид $\sin(\pi n z / d)$, характерный для частицы в квантовой яме с бесконечными потенциальными стенками:

$$\hat{\psi}_{t,s,n}(z) = \hat{C}_{t,s} \begin{cases} \sin(\pi n z / d), & 0 < z < d; \\ 0, & z < 0, z > d. \end{cases} \quad (2.246)$$

Столбцы $\hat{C}_{t,s}$ в (2.246) без учета нормировочного множителя имеют вид:

$$\hat{C}_{hh,1} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{C}_{hh,2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{C}_{lh,1} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{C}_{lh,2} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.247)$$

Перейдем к определению энергетического спектра дырок $E(K)$ с отличным от нуля волновым вектором K в плоскости квантовой ямы. При $K \neq 0$, $k_z \neq 0$ дырки испытывают наклонное (по отношению к нормали) отражение от обеих граничных поверхностей пленки.

Если секулярное уравнение объемной задачи (2.243) решить относительно $k_z^2(E)$, то получим решения двух типов, двукратно вырожденные по спину (см. (2.244)):

$$k_t = \sqrt{\frac{2m_t(-E)}{\hbar^2} - K^2}, \quad t = hh, lh. \quad (2.248)$$

Общее решение системы уравнений для огибающих (2.240) запишется в форме линейной суперпозиции частных решений (2.241) с индексами t (тип ветви), s (спиновое квантовое число) и с двумя знаками показателя экспоненты ($\pm i k_t z$):

$$\hat{\psi}(z) = \hat{\psi}_{t=hh}(z) + \hat{\psi}_{t=lh}(z), \quad (2.249)$$

где

$$\begin{aligned} \hat{\psi}_{hh}(z) = & \hat{C}_{hh,s=1}(k_{hh}, K) A_1 e^{ik_{hh}z} + \hat{C}_{hh,s=1}(-k_{hh}, K) B_1 e^{-ik_{hh}z} + \\ & + \hat{C}_{hh,s=2}(k_{hh}, K) A_2 e^{ik_{hh}z} + \hat{C}_{hh,s=2}(-k_{hh}, K) B_2 e^{-ik_{hh}z}, \end{aligned} \quad (2.250)$$

$$\begin{aligned} \hat{\psi}_{lh}(z) = & \hat{C}_{lh,s=1}(k_{lh}, K) A_3 e^{ik_{lh}z} + \hat{C}_{lh,s=1}(-k_{lh}, K) B_3 e^{-ik_{lh}z} + \\ & + \hat{C}_{lh,s=2}(k_{lh}, K) A_4 e^{ik_{lh}z} + \hat{C}_{lh,s=2}(-k_{lh}, K) B_4 e^{-ik_{lh}z}, \end{aligned} \quad (2.251)$$

A_1, \dots, B_4 – постоянные, которые определяются граничными условиями и нормировкой.

Столбцы $\hat{C}_{t,s}$ – собственные векторы гамильтониана (2.237), то есть их компоненты C_a выбираются как решения системы алгебраических уравнений (2.243), принадлежащие определенной ветви энергетического спектра. Для ветви тяжелых дырок ($t = hh$) разность $E - G$ отлична от нуля при любом K (и конечном k_z), поэтому решения системы (2.243) с номером $t = hh$ можно записать в виде:

$$C_4 = \frac{HC_3 + IC_6}{E - G}, \quad C_5 = \frac{IC_3 - HC_6}{E - G}. \quad (2.252)$$

Коэффициенты C_3 и C_6 остаются произвольными в соответствии с двукратным вырождением ветви тяжелых дырок по спину (крамерсово вырождение). Для того чтобы в пределе с $K \rightarrow 0$ получалось уже известное решение $\hat{C}_{hh,s}$ (2.247), положим

$$s = 1: C_3 = 1, C_6 = 0; \quad s = 2: C_3 = 0, C_6 = 1. \quad (2.253)$$

Если обозначить

$$a_t = \frac{2\sqrt{3}k_t K}{K^2 + 4k_t^2}, \quad b_t = \frac{\sqrt{3}K^2}{K^2 + 4k_t^2}, \quad (2.254)$$

то столбец огибающих функций для тяжелых дырок (2.250) запишется в виде:

$$\hat{\Psi}_{hh}(z) = \begin{pmatrix} 1 \\ a_{hh} \\ b_{hh} \\ 0 \end{pmatrix} A_1 e^{ik_{hh}z} + \begin{pmatrix} 1 \\ -a_{hh} \\ b_{hh} \\ 0 \end{pmatrix} B_1 e^{-ik_{hh}z} + \begin{pmatrix} 0 \\ b_{hh} \\ -a_{hh} \\ 1 \end{pmatrix} A_2 e^{ik_{hh}z} + \begin{pmatrix} 0 \\ b_{hh} \\ a_{hh} \\ 1 \end{pmatrix} B_2 e^{-ik_{hh}z}. \quad (2.255)$$

Здесь учтено, что при изменении знака k_t величина a_t изменяет свой знак, тогда как величина b_t знака не меняет.

Аналогичным образом, для ветви легких дырок решения системы (2.243) с номером $t = lh$ можно выбрать в следующей форме:

$$C_3 = \frac{HC_4 + IC_5}{E - F}, \quad C_6 = \frac{IC_4 - HC_5}{E - F}, \quad (2.256)$$

$$s = 1: C_4 = 1, C_5 = 0; \quad s = 2: C_4 = 0, C_5 = 1, \quad (2.257)$$

так что столбец огибающих функций для легких дырок (2.251) примет вид:

$$\hat{\psi}_{lh}(z) = \begin{pmatrix} -a_{lh} \\ 1 \\ 0 \\ -b_{lh} \end{pmatrix} A_3 e^{ik_{lh}z} + \begin{pmatrix} a_{lh} \\ 1 \\ 0 \\ -b_{lh} \end{pmatrix} B_3 e^{-ik_{lh}z} + \begin{pmatrix} -b_{lh} \\ 0 \\ 1 \\ a_{lh} \end{pmatrix} A_4 e^{ik_{lh}z} + \begin{pmatrix} -b_{lh} \\ 0 \\ 1 \\ -a_{lh} \end{pmatrix} B_4 e^{-ik_{lh}z}. \quad (2.258)$$

Выше мы видели, что при $K = 0$ состояния легких и тяжелых дырок квантуются отдельно друг от друга – их волновые функции удовлетворяют независимым уравнениям, а энергетический спектр состоит из двух независимых серий уровней (2.245) с $t = hh, lh$. Однако при $K \neq 0$ возникает совершенно другая ситуация – несмотря на то, что в объемной задаче по-прежнему существуют отдельные решения для тяжелых и легких дырок (2.255), (2.258), ни одно из них не может удовлетворять граничным условиям (2.235) для волновых функций в пленке. Например, условие $\hat{\psi}_{hh}(0) = 0$ дает систему уравнений

$$\begin{cases} A_1 + B_1 = 0 \\ a_{hh}(A_1 - B_1) + b_{hh}(A_2 + B_2) = 0 \\ b_{hh}(A_1 + B_1) - a_{hh}(A_2 - B_2) = 0 \\ A_2 + B_2 = 0 \end{cases} \quad (2.259)$$

которая при $a_{hh} \neq 0$ (то есть при $K \neq 0, k_z \neq 0$) имеет лишь тривиальное решение: $A_1 = B_1 = A_2 = B_2 = 0$.

В то же время, как будет видно ниже, общее решение $\hat{\psi}(z)$ в форме суммы волновых функций легких и тяжелых дырок будет подчиняться граничным условиям (2.235). Это означает, что при наклонном отражении от поверхности пленки ($K \neq 0$) возникает перемешивание состояний легких и тяжелых дырок друг с другом: можно сказать, что на поверхности пленки тяжелые дырки превращаются в легкие и наоборот. Такое превращение называют трансформацией дырок.

Итак, применим два граничных условия (2.235) к суммарной волновой функции (2.249)–(2.250). Эти условия дают для восьми коэффициентов A_i, B_i систему восьми однородных линейных уравнений.

Как уже отмечалось, при наклонном движении дырок относительно оси z граничные условия не выполняются отдельно для тяжелых или легких дырок. Легко проверить, что эти условия не выполняются и для суммы волновых функций легких и тяжелых дырок, если брать вклад только с одним знаком проекции спина J_z , например, – со «спином вдоль z » ($A_2 = B_2 = 0$, $A_4 = B_4 = 0$). Однако согласно теореме Крамерса искомый энергетический спектр должен быть двукратно вырожден по спину и, значит, система восьми уравнений может быть приведена к двум независимым системам (по четыре уравнения), которые дадут одно и то же дисперсионное уравнение для $E(K)$. Действительно, можно заметить, что при выполнении равенств

$$A_2 = -iA_1, \quad B_2 = -iB_1, \quad A_4 = iA_3, \quad B_4 = iB_3 \quad (2.260)$$

система восьми уравнений, возникающая из граничных условий (2.235), сводится к системе четырех уравнений (с ненулевыми решениями):

$$\left\{ \begin{array}{l} A_1 + B_1 - i\lambda_{lh}^* A_3 - i\lambda_{lh} B_3 = 0 \\ \lambda_{hh} A_1 + \lambda_{hh}^* B_1 + iA_3 + iB_3 = 0 \\ \varepsilon_{hh} A_1 + \varepsilon_{hh}^* B_1 - i\lambda_{lh}^* \varepsilon_{lh} A_3 - i\lambda_{lh} \varepsilon_{lh}^* B_3 = 0 \\ \lambda_{hh} \varepsilon_{hh} A_1 + \lambda_{hh}^* \varepsilon_{hh}^* B_1 + i\varepsilon_{lh} A_3 + i\varepsilon_{lh}^* B_3 = 0 \end{array} \right. , \quad (2.261)$$

где

$$\lambda_t = ia_t + b_t = \frac{\sqrt{3} K}{K - 2i k_t}, \quad (2.262)$$

$$\varepsilon_t = e^{ik_t d}. \quad (2.263)$$

Вводя обозначение

$$f(k_{lh}, k_{hh}, K) = \frac{4K^4 + K^2(k_{lh}^2 + k_{hh}^2) + 4k_{lh}^2 k_{hh}^2}{6k_{lh} k_{hh} K^2} \quad (2.264)$$

и вычисляя детерминант системы (2.261), можно убедиться, что характеристическое уравнение для системы однородных уравнений (2.261) имеет вид [17]

$$1 - \cos(k_{lh}d) \cos(k_{hh}d) = -f(k_{lh}, k_{hh}, K) \sin(k_{lh}d) \sin(k_{hh}d). \quad (2.265)$$

С учетом определения (2.248) для k_t это есть трансцендентное уравнение (ДУ), позволяющее найти искомый энергетический спектр $E(K)$ дырок в бесконечной квантовой яме шириной d .

Если вместо (2.260) требовать выполнения равенств

$$A_2 = iA_1, \quad B_2 = iB_1, \quad A_4 = -iA_3, \quad B_4 = -iB_3, \quad (2.266)$$

то для A_1, B_2, A_3, B_4 из граничных условий возникает система четырех однородных уравнений с тем же самым секулярным уравнением (2.265), что соответствует двукратному крамерсовскому вырождению размерно-квантованного спектра энергии дырок.

При $K = 0$ ДУ (2.265) дает уже известный набор размерно-квантованных уровней энергии (2.245). Ветви энергетического спектра $E_{t,n}(K)$ можно пронумеровать индексами $t = hh, lh$ и $n = 1, 2, 3, \dots$, указывающими, какой из уровней размерного квантования (2.245) является краем данной подзоны в пределе с $K \rightarrow 0$.

На рис. 2.13, *a* приведен результат численного решения ДУ (2.265) с величиной $m_{lh}/m_{hh} = 0,15$. Для сравнения на рис. 2.13, *б* изображены подзоны дырок, найденные по формулам, аналогичным формуле (1.25) в однозонной модели квантовой ямы с бесконечно высокими потенциальными барьерами:

$$E = -\frac{\hbar^2 K^2}{2m_{lh}} - \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_{lh} d^2} n^2, \quad E = -\frac{\hbar^2 K^2}{2m_{hh}} - \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m_{hh} d^2} n^2. \quad (2.267)$$

Сравнение рисунков 2.13, *a* и 2.13, *б* показывает, что эффект трансформации дырок в рассмотренной модели приводит к

антипересечениям ветвей легких и тяжелых носителей заряда с номерами n противоположной четности. Кроме того, у краев подзон размерного квантования возникает существенное отличие значений эффективной массы носителей заряда от объемных величин m_{lh} , m_{hh} . Некоторые ветви даже выглядят вогнутыми вниз, то есть они характеризуются «электронным» знаком эффективной массы. В то же время кривизна подзоны тяжелых дырок $h1$ в точке $K=0$ возросла – на этой ветви энергетического спектра «тяжелые» дырки, движущиеся с малым импульсом $\hbar K$ параллельно плоскости пленки, стали «легкими».

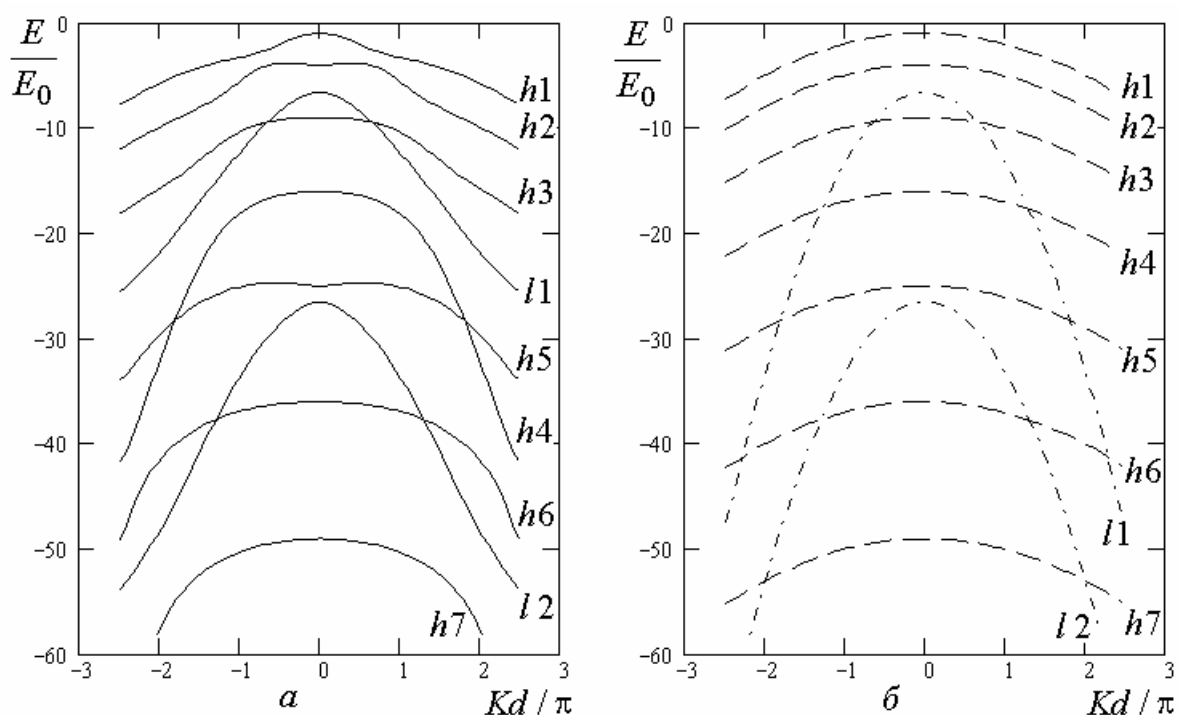


Рис. 2.13. Проявления трансформации легких и тяжелых дырок.

a – размерно-квантованный спектр энергии дырок в бесконечно глубокой потенциальной яме шириной d , найденный в рамках изотропной модели Латтинжера для объемного спектра валентной зоны; K – волновой вектор дырок в плоскости квантовой ямы; значения энергии приведены в единицах $E_0 = \pi^2 \hbar^2 / (2m_{hh}d^2)$. b – результат расчета размерно-квантованного спектра энергии дырок по формулам однозонной модели (2.267), то есть – в отсутствие взаимной трансформации легких и тяжелых дырок; штриховые линии – подзоны тяжелых дырок, штрих-пунктир – подзоны легких дырок. Расчеты выполнены при $m_{lh}/m_{hh} = 0,15$.

Причину трансформации дырок легко пояснить следующим образом. В объемном изотропном материале проекция момента импульса J_z на произвольное направление, выбранное в качестве оси z , сохраняется в силу симметрии к поворотам вокруг оси z . Если ось z выбрана вдоль волнового вектора дырки \mathbf{k} , то $K = 0$, и гамильтониан Латтинжера (2.237), относящийся к базису (2.66) с $J_z = 3/2, 1/2, -1/2, -3/2$, имеет диагональный вид,

$$\begin{array}{cccc}
 & 3/2 & 1/2 & -1/2 & -3/2 \\
 3/2 & \left(-\hbar^2 k_z^2 / 2m_{hh} & 0 & 0 & 0 \right) \\
 1/2 & \left(0 & -\hbar^2 k_z^2 / 2m_{lh} & 0 & 0 \right) \\
 -1/2 & \left(0 & 0 & -\hbar^2 k_z^2 / 2m_{lh} & 0 \right) \\
 -3/2 & \left(0 & 0 & 0 & -\hbar^2 k_z^2 / 2m_{hh} \right)
 \end{array}$$

Можно сказать, что тяжелым дыркам соответствуют сохраняющиеся значения $J_z = \pm 3/2$, а легким дыркам отвечают сохраняющиеся значения $J_z = \pm 1/2$. В квантовой яме при наклонном отражении дырки от потенциальных барьеров симметрия к поворотам вокруг направления \mathbf{k} отсутствует. В этом случае на стенках ямы может изменяться как знак, так и абсолютная величина проекции момента J_z , а это означает, что становится возможным превращение легкой дырки в тяжелую и наоборот.

2.4.2. Квантовая яма с конечными барьерами в модели Латтинжера

Рассмотрим в рамках изотропной модели Латтинжера (2.237)–(2.238) задачу о размерном квантовании энергии дырок в симметричной квантовой яме $V \setminus A \setminus V$ с барьерами конечной высоты.

Общее решение для огибающих функций $\Psi_{a=3,4,5,6}$ в однородном слое с составом X запишем в виде:

$$\hat{\psi}(z, X) = \sum_{t=1, \dots, 4} (A_{X,t} \hat{C}_t(k_t, K) e^{ik_t z} + B_{X,t} \hat{C}_t(-k_t, K) e^{-ik_t z}). \quad (2.268)$$

Здесь индекс t включает указатель типа ветви энергетического спектра (lh, hh) и спиновое квантовое число $s = 1, 2$, по которому ветви двукратно вырождены. Условимся, что значения $t = 1, 2, 3, 4$ нумеруют ветви lh,1, lh,2, hh,1, hh,2, соответственно. Проекция волнового вектора на ось z , перпендикулярную слоям $B \setminus A \setminus B$, описывается формулами (2.248):

$$\begin{aligned} k_{lh,1} = k_{lh,2} &= \sqrt{\frac{2m_{lh}(X)}{\hbar^2} (E_v(X) - E) - K^2}, \\ k_{hh,1} = k_{hh,2} &= \sqrt{\frac{2m_{hh}(X)}{\hbar^2} (E_v(X) - E) - K^2}. \end{aligned} \quad (2.269)$$

Столбцы $\hat{C}_t(k_t, K)$ в (2.268) определяются по аналогии с формулами (2.252)–(2.258) с учетом нумерации ветвей спектра индексом $t = 1, 2, 3, 4$, как условлено выше.

Подчиним волновые функции $\psi_a(z)$, входящие в (2.268), граничным условиям, выбрав их в форме соотношений непрерывности

$$\hat{\psi}|_A = \hat{\psi}|_B, \quad (2.270)$$

$$\hat{V}_z \hat{\psi}|_A = \hat{V}_z \hat{\psi}|_B, \quad (2.271)$$

где $\hat{V}_z = \partial \hat{H}(K, \hat{k}_z) / \partial \hat{k}_z$ – матрица 4×4 , содержащая оператор $\hat{k}_z = -id / dz$ и кусочно-непрерывные функции A и B переменной состава X , определяемые в соответствии с (2.239) через заданные эффективные массы дырок:

$$A(X) = \frac{\hbar^2}{4m_0} \left(\frac{m_0}{m_{lh}(X)} + \frac{m_0}{m_{hh}(X)} \right), \quad B(X) = \frac{\hbar^2}{4m_0} \left(\frac{m_0}{m_{lh}(X)} - \frac{m_0}{m_{hh}(X)} \right). \quad (2.272)$$

С учетом (2.237)–(2.238) получим:

$$\hat{V}_z = \frac{\partial \hat{H}(K, \hat{k}_z)}{\partial \hat{k}_z} = \begin{pmatrix} -2(A-B)\hat{k}_z & \sqrt{3}BK & 0 & 0 \\ \sqrt{3}BK & -2(A+B)\hat{k}_z & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2(A+B)\hat{k}_z & -\sqrt{3}BK \\ 0 & 0 & -\sqrt{3}BK & -2(A-B)\hat{k}_z \end{pmatrix}. \quad (2.273)$$

Совокупность граничных условий (2.270)–(2.271) можно представить в форме $\hat{L} v|_A = \hat{L} v|_B$, где v – восьмикомпонентный столбец, у которого первые четыре компоненты есть функции $A_{X,t} e^{ik_t z}$, а следующие четыре компоненты – функции $B_{X,t} e^{-ik_t z}$, с номерами $t = 1, 2, 3, 4$; $\hat{L}(E, K, X)$ – матрица 8×8 :

$$\begin{pmatrix} -a_{lh} & -b_{lh} & 1 & 0 & a_{lh} & -b_{lh} & 1 & 0 \\ 1 & 0 & a_{hh} & b_{hh} & 1 & 0 & -a_{hh} & b_{hh} \\ 0 & 1 & b_{hh} & -a_{hh} & 0 & 1 & b_{hh} & a_{hh} \\ -b_{lh} & a_{lh} & 0 & 1 & -b_{lh} & -a_{lh} & 0 & 1 \\ c_{lh} + f & d_{lh} & g_{hh}^- & b_{hh}f & c_{lh} + f & -d_{lh} & -g_{hh}^- & b_{hh}f \\ -g_{lh}^+ & -b_{lh}f & f - c_{hh} & -d_{hh} & g_{lh}^+ & -b_{lh}f & f - c_{hh} & d_{hh} \\ b_{lh}f & -g_{lh}^+ & -d_{hh} & c_{hh} - f & b_{lh}f & g_{lh}^+ & d_{hh} & c_{hh} - f \\ d_{lh} & -c_{lh} - f & -b_{hh}f & g_{hh}^- & -d_{lh} & -c_{lh} - f & -b_{hh}f & -g_{hh}^- \end{pmatrix}, \quad (2.274)$$

где a_τ и b_τ с индексом $\tau = lh, hh$ определяются формулами (2.254),

$$c_{lh} = \frac{m_0}{m_{hh}} a_{lh} k_{lh}, \quad c_{hh} = \frac{m_0}{m_{lh}} a_{hh} k_{hh}, \quad d_{lh} = \frac{m_0}{m_{hh}} b_{lh} k_{lh}, \quad d_{hh} = \frac{m_0}{m_{lh}} b_{hh} k_{hh},$$

$$f = \frac{\sqrt{3}}{4} \left(\frac{m_0}{m_{lh}} - \frac{m_0}{m_{hh}} \right) K, \quad g_{lh}^\pm = a_{lh} f \pm k_{lh} \frac{m_0}{m_{lh}}, \quad g_{hh}^\pm = a_{hh} f \pm k_{hh} \frac{m_0}{m_{hh}}. \quad (2.275)$$

Численный расчет подзон размерного квантования $E(K)$ в квантовой яме $B \setminus A \setminus B$ мы выполняем по формулам (2.203)–(2.209) с t -матрицами размером 8×8 и с S -матрицей 4×4 (понижение размера матриц, возможное в силу двукратного крамерсова вырождения ветвей спектра $E(K)$, здесь не проведено). На рис. 2.14 представлен результат расчета дырочных подзон с частными значениями параметров квантовой ямы.

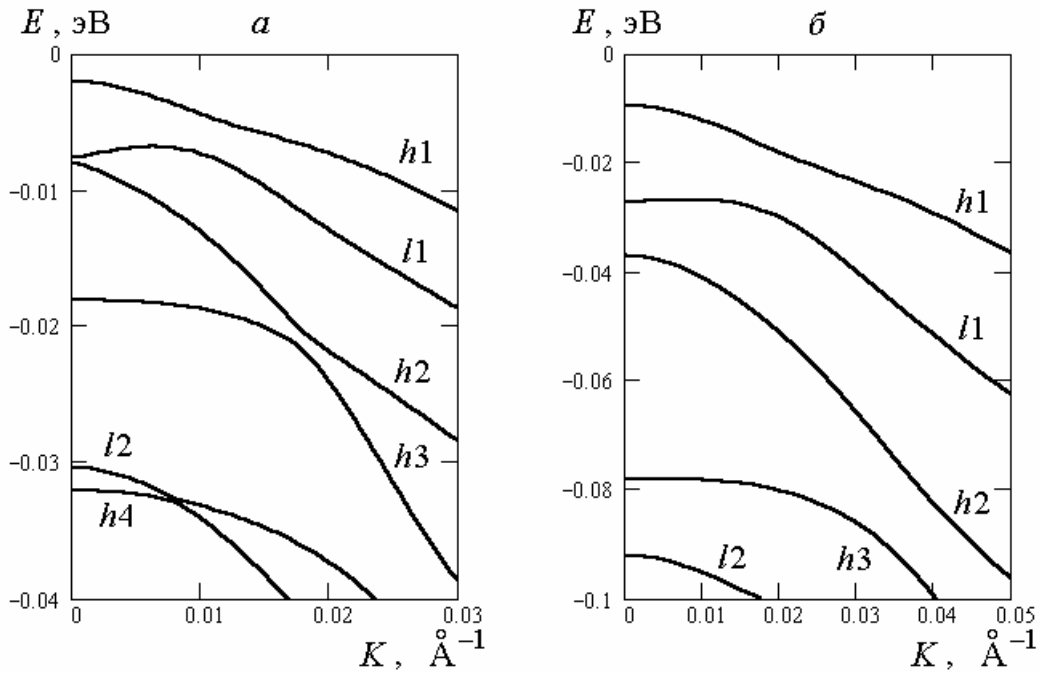


Рис. 2.14. Размерно-квантованные подзоны дырок в модели Латтинжера. *a* – размерно-квантованный спектр энергии дырок $E_n(K)$ в квантовой яме с барьерами конечной высоты W , найденный в рамках изотропной модели Латтинжера для объемного спектра валентной зоны со следующими параметрами: $m_{hh}/m_0 = 0,4$, $(m_{lh}/m_0)^{-1} = 11,5(1-X) + 4,8X$. В области ямы $X = 0$, в области барьеров $X = 0,3$. Ширина квантовой ямы $d = 200 \text{ \AA}$; величина барьера для дырок $W = 0,15 \text{ эВ}$. Начало отсчета энергии выбрано на уровне края валентной зоны в области потенциальной ямы: $E_v(X=0) = 0$. K – волновой вектор в плоскости квантовой ямы. *б* – результат аналогичного расчета при $X = 0,2$, $d = 80 \text{ \AA}$, $W = 0,1 \text{ эВ}$.

Видно, что при конечной высоте барьеров размерно-квантованный спектр энергии дырок имеет те же качественные черты, которые обсуждались в предыдущем разделе для модели ямы с бесконечными барьерами (см. также рис. 2.12, *a* в разделе 2.3.5). Эти черты обусловлены эффектом трансформации дырок с $K \neq 0$ на интерфейсах гетероструктуры.

Поскольку при нулевой составляющей волнового вектора в плоскости интерфейсов ($K = 0$) взаимодействие легких и тяжелых дырок исчезает, размерно-квантованные уровни энергии $E_n(0)$ могут быть найдены также из однозонного уравнения (1.46) в применении к легким (l) и тяжелым (h) дыркам по отдельности. Это позволяет сопоставить подзонам $E_n(K)$ значки l , h , которые, как и на рис. 2.13, указывают, какой из уровней размерного квантования однозонной модели является краем

данной подзоны в пределе с $K \rightarrow 0$. Однако из-за сложной формы кривых $E_n(K)$, обусловленной трансформацией дырок, теряется буквальный смысл терминов «легкие» и «тяжелые» носители заряда.

2.5. ИНТЕРФЕЙСНЫЕ СОСТОЯНИЯ В ГЕТЕРОСТРУКТУРЕ С БЕСЩЕЛЕВЫМ ПОЛУПРОВОДНИКОМ

Рассмотрим гетеропереход В\А, образованный слоем обычного полупроводника В и слоем бесщелевого полупроводника А. Пусть валентная зона обычного полупроводника состоит из вырожденных в точке Γ ветвей легких (lh) и тяжелых (hh) дырок с симметрией Γ_8 , а у бесщелевого полупроводника симметрию Γ_8 имеют вырожденные в точке Γ зона проводимости (el) и зона дырок (hh), см. рис. 2.15. Пример такой структуры – гетеропереход между CdTe в роли обычного полупроводника и HgTe в качестве бесщелевого полупроводника. В рассматриваемом примере уровень $E_{v,A} = E_{c,A}$ расположен выше края валентной зоны $E_{v,B}$ на некоторую величину W .

Если свойства такого гетероперехода описывать, для простоты, в однозонном приближении, то следует выбрать для рассмотрения ветвь энергетического спектра с заданным типом базисных волновых функций. Например, выберем состояния типа $|3/2, \pm 1/2\rangle$, принадлежащие двукратно вырожденной по спину ветви легких частиц, а состояния $|3/2, \pm 3/2\rangle$, относящиеся к двукратно вырожденной по спину ветви тяжелых дырок, пока не будем принимать во внимание. Выбранные для рассмотрения частицы в слое В обладают законом дисперсии легких дырок (lh), а в слое А – законом дисперсии электронов (el), и поэтому при переходе частицы из одного слоя в другой изменяется знак (и величина) ее эффективной массы.

Граничные условия имеют вид соотношений (1.31)–(1.32) (эти соотношения, стандартные для однозонной модели, называют условиями Бастарда):

$$\psi|_A = \psi|_B, \quad (2.276, a)$$

$$\left. \frac{1}{m(z)} \frac{d\psi}{dz} \right|_A = \left. \frac{1}{m(z)} \frac{d\psi}{dz} \right|_B. \quad (2.276, б)$$

Из (2.276, б) видно, что в случае противоположных по знаку значений эффективной массы $m(z)$ в слоях В и А будут противоположными по знаку и значения производной волновой функции. Другими словами, график огибающей функции $\psi(z)$ на границе В\А испытывает резкий излом, так что в области В функция $\psi(z)$ может быть возрастающей с ростом z , а в области А – убывающей. При монотонном, экспоненциальном убывании волновой функции в обе стороны в глубь от граничной поверхности такое решение описывает не что иное, как интерфейсное состояние частицы – состояние, локализованное на границе раздела слоев А и В. В разделе 2.3.4 рассматривались интерфейсные состояния, обусловленные неочевидными свойствами многозонной модели Кейна с бесконечной массой тяжелых дырок, однако здесь речь идет о более простой ситуации.

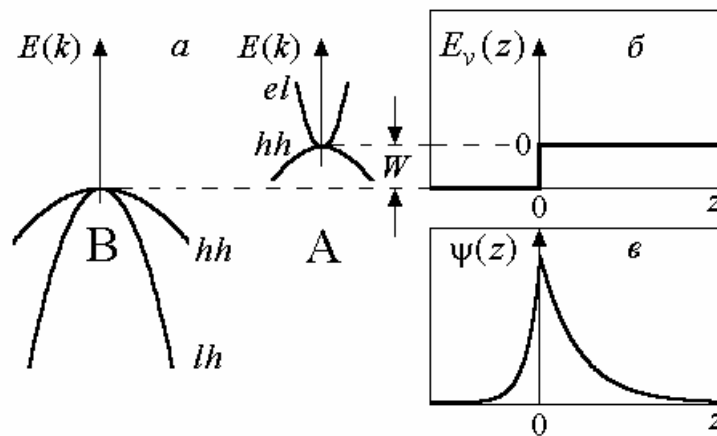


Рис. 2.15. Гетеропереход В\А с бесщелевым полупроводником А.
a – ветви электронного энергетического спектра с симметрией Γ_8 в материалах В и А в том случае, когда материал А – бесщелевой полупроводник.
б – энергетическая диаграмма одиночного гетероперехода В\А.
в – волновая функция интерфейсного состояния легкой частицы (el в слое А, lh в слое В), локализованного на одиночном гетеропереходе.

Для того чтобы убедиться в существовании интерфейсного состояния в указанной простой модели и найти его энергию, решим

однозонное уравнение Шредингера (1.28) для огибающей функции $\psi(z)$ легкой частицы:

$$-\frac{\hbar^2}{2(-m_B)} \frac{d^2\psi}{dz^2} + \frac{\hbar^2 K^2}{2(-m_B)} \psi + (-W)\psi = E\psi \quad \text{в слое В,}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m_A} \frac{d^2\psi}{dz^2} + \frac{\hbar^2 K^2}{2m_A} \psi = E\psi \quad \text{в слое А.} \quad (2.277)$$

Здесь, как и всюду выше, K – волновой вектор в плоскости интерфейса, ось z перпендикулярна этой плоскости, W – величина разрыва края валентной зоны, $m_A > 0$ и $m_B > 0$ – абсолютные значения эффективной массы легкой частицы. Мы пользуемся электронной шкалой энергии; при этом дырочный характер частицы в слое В учитывается тем, что область актуальных значений энергии дырок есть $E < 0$ (при выборе $E_{v,A} = 0$), а масса m_B берется со знаком минус:

$$m(z) = \begin{cases} m_A > 0, & z \in A, \\ -m_B < 0, & z \in B. \end{cases} \quad (2.278)$$

Если частные решения уравнений (2.277) искать в виде $\exp(\pm ik_z z)$, то для z -составляющей волнового вектора в слоях В и А получим следующие выражения:

$$k_{z,B} = \sqrt{\frac{2m_B}{\hbar^2}(-W - E) - K^2}, \quad (2.279)$$

$$k_{z,A} = \sqrt{\frac{2(-m_A)}{\hbar^2}(-E) - K^2}. \quad (2.280)$$

Выражение (2.279) дает вещественные значения волнового вектора, когда значения энергии берутся в области $E < -W$ (континуум для дырок в слое В), а выражение (2.280) вещественно в области $E > 0$ (континуум для электронов в $e1$ -зоне слоя А). Вне указанных областей обе формулы дают

мнимые значения, и мы можем выразить их через положительные величины γ_B и γ_A :

$$k_{z,B} = i\gamma_B \quad \text{и} \quad k_{z,A} = i\gamma_A \quad \text{при} \quad -W < E < 0. \quad (2.281)$$

Волновую функцию интерфейсного состояния, локализованного на одиночном гетеропереходе (с координатой $z = 0$), ищем в виде экспоненциальной функции, убывающей в глубь от граничной поверхности,

$$\psi(z) = \begin{cases} B_1 \exp(\gamma_B z), & z < 0, \\ A_2 \exp(-\gamma_A z), & z > 0, \end{cases} \quad (2.282)$$

где при $K = 0$, согласно (2.279)–(2.281),

$$\gamma_B = \sqrt{\frac{2m_B}{\hbar^2}(W + E)}, \quad \gamma_A = \sqrt{\frac{2m_A}{\hbar^2}(-E)}, \quad -W < E < 0, \quad (2.283)$$

B_1 и A_2 – постоянные, определяемые граничными условиями и нормировкой. Из граничного условия (2.276, а) следует, что $B_1 = A_2$, и тогда граничное условие (2.276, б) принимает вид:

$$\frac{-\gamma_A}{m_A} = \frac{\gamma_B}{-m_B}. \quad (2.284)$$

Это условие является уравнением для энергии E интерфейсного состояния. Решая его с учетом выражений (2.283), находим единственный корень:

$$E_S = -W \frac{m_A}{m_A + m_B}. \quad (2.285)$$

Таким образом, в случае одиночного гетероперехода, образованного материалами с различным знаком эффективной массы носителей заряда, существует одно интерфейсное состояние. Длина локализации этого

состояния в слоях В и А определяется обратными значениями мнимых волновых векторов (2.283) с $E = E_S$.

Теперь рассмотрим симметричный двойной гетеропереход В\А\В с бесщелевым полупроводником А. Если толщина d слоя А намного превышает длину локализации интерфейсного состояния одиночного гетероперехода, то в этой системе могут присутствовать два независимых интерфейсных состояния с одинаковой энергией (2.285): одно состояние локализуется на левой границе (В\А), а другое – на правой (А\В). С уменьшением d волновые функции этих состояний начинают перекрываться и, как обычно бывает в подобных задачах, уровень энергии расщепляется на два уровня; в симметричной структуре нижнему уровню должна соответствовать четная волновая функция, верхнему – нечетная.

Наряду с интерфейсными состояниями в гетероструктуре В\А\В образуются еще и обычные подзоны размерно-квантованных электронных состояний (с энергией $E_n(K) > 0$). Они возникают потому, что для электрона в слое А слои В представляют потенциальные барьеры, так что слой А является квантовой ямой. С уменьшением толщины ямы d электронные уровни энергии смещаются вверх. Если при этом верхний уровень энергии интерфейсного состояния переходит в область $E > 0$, то его волновой вектор (2.280) становится действительным, так что интерфейсное состояние превращается в обычное размерно-квантованное состояние. Уровень другого интерфейсного состояния с уменьшением d движется вниз, это состояние не изменяет своего характера.

Чтобы найти критическое значение d_1 толщины ямы, при котором верхний уровень энергии интерфейсного состояния с $K = 0$ пересекает отметку $E = 0$, воспользуемся уравнением (1.54) для нечетных состояний. В пределе с $k_{z,A} \rightarrow 0$ оно дает:

$$d_1 = \frac{2m_B}{m_A} \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m_B W}}. \quad (2.286)$$

При $d < d_1$ в квантовой яме существует только одно интерфейсное состояние.

Для детального описания указанной картины электронных состояний следует решить уравнения (2.277) применительно к гетероструктуре В\А\В, рассматривая область значений энергии $E > -W$. Волновую функцию электрона, локализованного в квантовой яме, можно искать в виде

$$\psi(z) = \begin{cases} B_1 e^{-ik_{z,B}z}, & z < 0, \\ A_2 e^{ik_{z,A}z} + B_2 e^{-ik_{z,A}z}, & 0 < z < d, \\ A_3 e^{ik_{z,B}(z-d)}, & z > d, \end{cases} \quad (2.287)$$

где z -составляющие волнового вектора определяются формулами (2.279)–(2.280). Величина $k_{z,B}$ – мнимая в любом случае, а величина $k_{z,A}$ будет мнимой для интерфейсного состояния и действительной для обычного размерно-квантованного состояния. Поскольку выражение (2.287) аналогично (1.41), очевидно, что граничные условия (2.276) приведут к дисперсионному уравнению типа (1.46); решая такое уравнение относительно переменной E , можно найти уровни энергии как интерфейсных состояний, так и обычных размерно-квантованных состояний легких частиц в симметричной структуре В\А\В с бесщелевым полупроводником А.

Вспомним теперь, что в случае зон с симметрией Γ_8 в материалах А и В имеется ветвь тяжелых дырок hh . Поскольку в рассматриваемом примере энергия $E_{v,A} = E_{c,A}$ больше, чем $E_{v,B}$ (на величину W), слой А является также квантовой ямой для тяжелых дырок – с высотой барьеров, равной W . Размерно-квантованные подзоны тяжелых дырок в однозонном приближении определяются еще одним уравнением типа (1.46), не связанным с дисперсионным уравнением легких частиц. В него войдут абсолютные значения эффективных масс тяжелых дырок $m_{hA} > 0$ (в слое А) и $m_{hB} > 0$ (в слое В).

Отметим, что в практическом вычислении удобно ввести следующие функции формальной «переменной состава» X . Эффективная масса легких (l) и тяжелых (h) частиц:

$$m_l(X) = \begin{cases} -m_A, & X = 0, \\ m_B, & X \neq 0, \end{cases} \quad m_h(X) = \begin{cases} m_{hA}, & X = 0, \\ m_{hB}, & X \neq 0. \end{cases} \quad (2.288)$$

Энергия края валентной зоны:

$$E_v(X) = \begin{cases} 0, & X = 0, \\ -W, & X \neq 0. \end{cases}$$

Волновой вектор легких (l) и тяжелых (h) частиц, определенный в соответствии с формулами (2.279)–(2.280):

$$k_l(E, K, X) = \sqrt{\frac{2m_l(X)}{\hbar^2}(E_v(X) - E) - K^2}, \quad (2.289, a)$$

$$k_h(E, K, X) = \sqrt{\frac{2m_h(X)}{\hbar^2}(E_v(X) - E) - K^2}. \quad (2.289, б)$$

Функция $\beta(E, K)$ в дисперсионном уравнении типа (1.46) для легких (l) и тяжелых (h) частиц:

$$\beta_t(E, K) = \frac{k_t(E, K, 0) m_t(1)}{(-i) k_t(E, K, 1) m_t(0)}, \quad t = l, h.$$

Дисперсионное уравнение однозонной модели для легких ($t = l$) или тяжелых ($t = h$) частиц:

$$f_t(E, K, d) = 0, \quad (2.290)$$

где

$$f_t(E, K, d) = \left(\frac{1}{\beta_t(E, K)} - \beta_t(E, K) \right) \sin(k_t(E, K, 0) d) + 2 \cos(k_t(E, K, 0) d). \quad (2.291)$$

Пример решений уравнений (2.290) представлен на рис. 2.16 и рис. 2.17, a .

Отметим также, что введенное здесь описание эффективных масс (2.288) и волновых векторов (2.289) можно непосредственно использовать в формулах (2.268)–(2.275) для расчета энергетического спектра структуры В\А\В с бесщелевым полупроводником А в изотропной модели Латтинжера. Переход от однозонного приближения к модели Латтинжера позволяет выявить роль взаимодействия легких и тяжелых частиц, см. рис. 2.17. Приведенная здесь формулировка задачи отличается от рассмотренной в разделе 2.4.2 заменой положительного абсолютного значения массы легких дырок в слое А на отрицательную величину $-m_A$, относящуюся к электронной ветви объемного энергетического спектра.

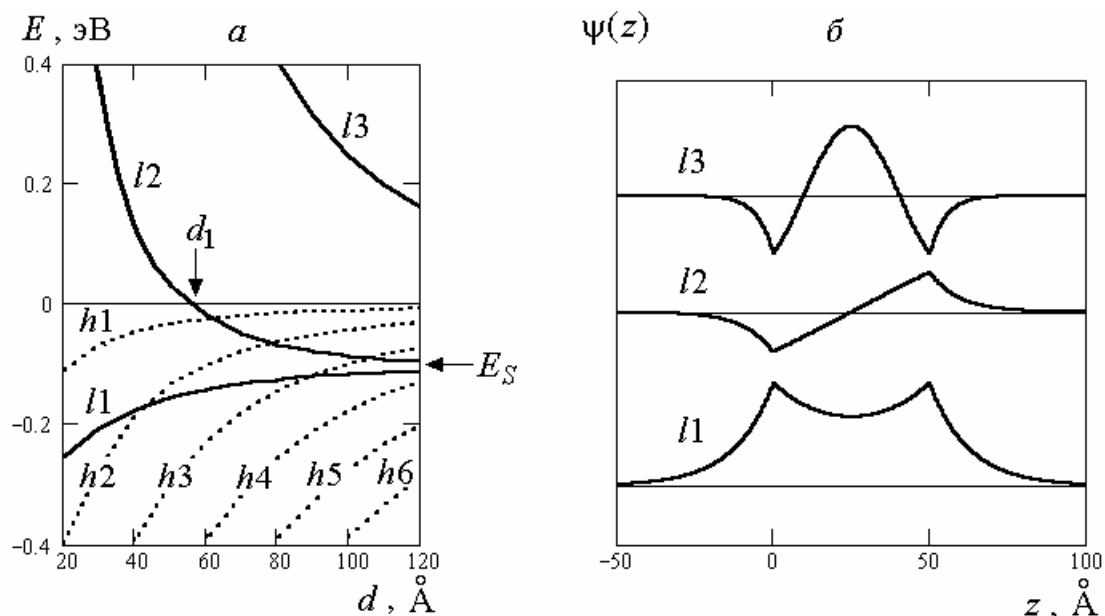


Рис. 2.16. Интерфейсные состояния электрона в квантовой яме с бесщелевым полупроводником.

a – уровни $E_n(K=0)$ размерного квантования в симметричной квантовой яме В\А\В с бесщелевым полупроводником А в зависимости от толщины ямы d . Сплошные кривые – уровни энергии легкой частицы $l1$ – $l3$; уровню $l1$ принадлежит четное интерфейсное состояние, уровню $l2$ принадлежит нечетное состояние, являющееся интерфейсным при $E < 0$. Пунктирные кривые – уровни энергии тяжелой дырки. *б* – волновые функции состояний $l1$ – $l3$ (при $K=0$) в яме толщиной $d = 50 \text{ \AA} < d_1 = 55,8 \text{ \AA}$.

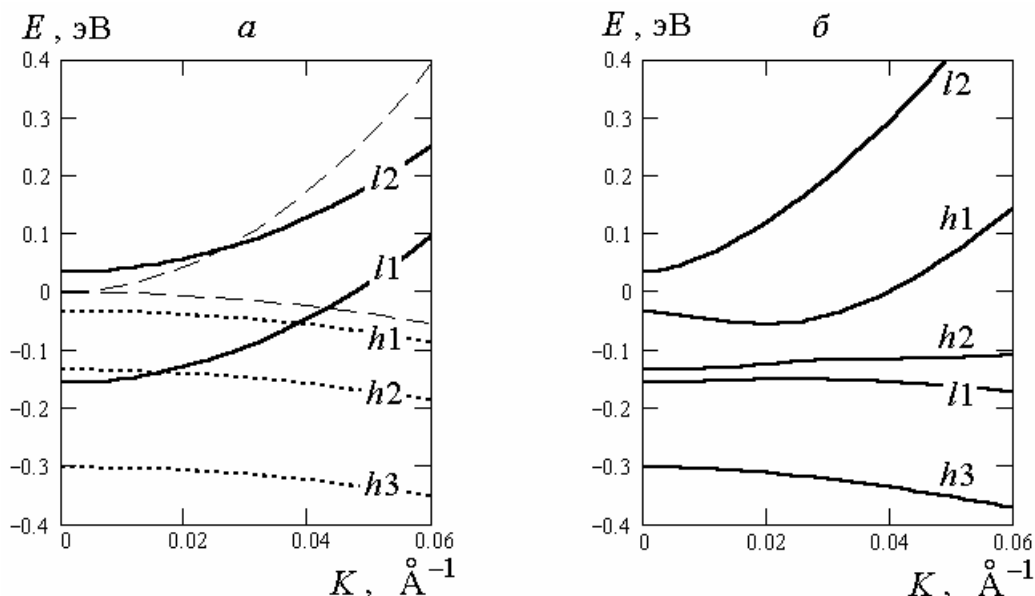


Рис. 2.17. Подзоны в квантовой яме с бесщелевым полупроводником. *a* – ветви спектра энергии $E_n(K)$ в плоскости квантовой ямы $B \setminus A \setminus B$ с бесщелевым полупроводником A толщиной $d = 50 \text{ \AA}$ для легкой частицы ($l1, l2$) и тяжелой дырки ($h1-h3$), найденные в однозонном приближении (2.290)–(2.291). На плоскости E, K ниже верхней штриховой кривой волновой вектор легкой частицы k_l принимает мнимые значения, в этой области волновые функции имеют характер интерфейсных состояний; выше нижней штриховой кривой мнимые значения принимает волновой вектор тяжелой дырки k_h . *б* – ветви спектра энергии $E_n(K)$, найденные для этой же самой задачи в изотропной модели Латтинжера. Маркировка ветвей значками l и h произведена по значениям энергии в пределе с $K \rightarrow 0$, одинаковым на рисунках *a* и *б*. Значения параметров в расчетах, представленных на рис. 2.16–2.17, составляли: $W = 0,4 \text{ эВ}$, $m_A = 0,035 m_0$, $m_B = 0,1 m_0$, $m_{hA} = 0,25 m_0$, $m_{hB} = 0,5 m_0$.

Как показывает рис. 2.17, *б*, взаимодействие легкой и тяжелой ветвей Γ_8 , возникающее при $K \neq 0$ вследствие трансформации носителей заряда на границах квантовой ямы, существенно влияет на картину размерно-квантованного спектра энергии $E_n(K)$. Например, ветвь $h1$, которая без учета указанного взаимодействия является обычной подзоной тяжелой дырки, с учетом взаимодействия приобретает с ростом K электронный характер и трансформируется в ветвь интерфейсных состояний.

Следует отметить, что в промежуток энергии протяженностью 1–2 эВ наряду с состояниями Γ_8 могут попадать состояния Γ_6 и Γ_7 . Так, в CdTe состояния Γ_6 соответствуют электронной зоне проводимости, расположенной над краем валентной зоны, а в HgTe – инвертированной

«зоне проводимости» с дырочным знаком кривизны, расположенной ниже края валентной зоны. Различие в знаке эффективной массы может приводить к возникновению интерфейсных Γ_6 -состояний. Более последовательный подход включает рассмотрение Γ_6 - и Γ_8 -ветвей в рамках единой многозонной схемы. Однако с ростом диапазона энергии увеличиваются и характерные значения волнового вектора k . Если длина локализации пограничных состояний или другие характерные значения k^{-1} приближаются к межатомным расстояниям, то подход к расчету энергетического спектра должен быть «микроскопическим», например, как в методе сильной связи. Такой подход является более сложным, чем метод огибающих функций, здесь он не рассматривается.

2.6. РАЗМЕРНОЕ КВАНТОВАНИЕ В АНИЗОТРОПНОЙ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОЙ ЗОНЕ

2.6.1. Уравнения размерного квантования энергии в многодолинной зоне проводимости.

Обратимся к задаче о размерном квантовании электронных состояний в гетероструктурах, образованных полупроводниковыми материалами с анизотропным энергетическим спектром (2.21) зоны проводимости:

$$E(\mathbf{k}) = E_c + \frac{\hbar^2}{2} \sum_i \sum_j (m^{-1})_{ij} k_i k_j, \quad i, j = x, y, z. \quad (2.292)$$

В наиболее важных для практики примерах анизотропия эффективной массы связана с многодолинным характером зоны проводимости (см. рис. 2.18–2.19), так что выражение (2.292) следует отнести к отдельно взятой долине с каким-либо номером m . При этом подразумевается, что начало отсчета волнового вектора в (2.292) помещено в центр долины $\mathbf{k}_{0,m}$. От номера долины m зависит также тензор обратной эффективной массы электронов $(m^{-1})_{ij}$, а если долины не эквивалентны, то – и уровень края зоны проводимости E_c .

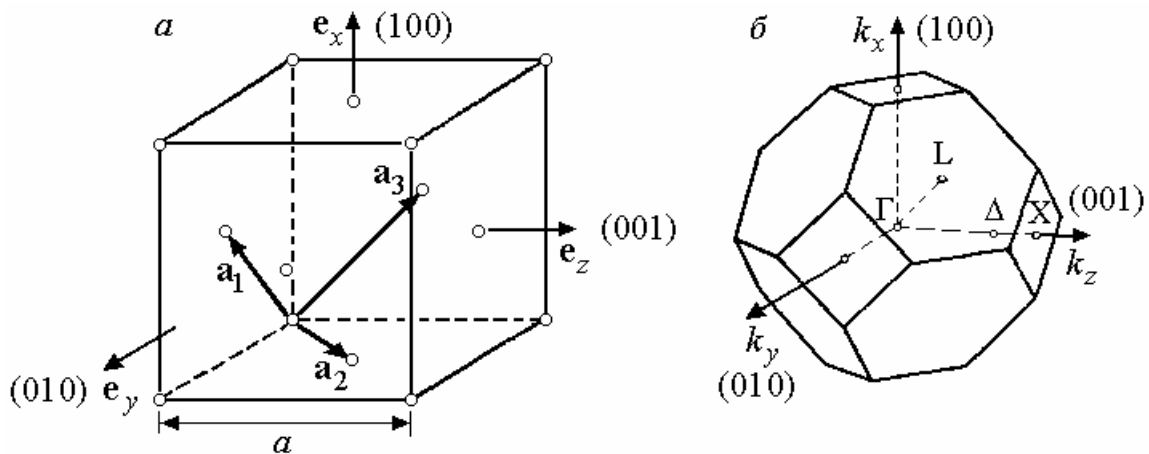


Рис. 2.18. Кубическая гранецентрированная решетка Браве.

a – ячейка гранецентрированной кубической решетки Браве с постоянной решетки a ; $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ – базисные векторы решетки Браве (которыми определяются векторы трансляции кристалла $\mathbf{R} = l_1\mathbf{a}_1 + l_2\mathbf{a}_2 + l_3\mathbf{a}_3$, l_i – целые числа); $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$ – орты декартовой системы координат x, y, z , выбранные вдоль кристаллографических направлений $(100), (010), (001)$. \mathcal{b} – первая зона Бриллюэна и некоторые характерные точки в ней для кубических кристаллов с гранецентрированной кубической решеткой Браве. Гранецентрированной кубической решетке Браве соответствует объемноцентрированная кубическая обратная решетка. Координатные оси k_x, k_y, k_z , выбраны в направлениях $(100), (010), (001)$ соответственно. Координаты указанных на рисунке точек X и L есть $(0,0,2\pi/a)$ и $(\pi/a, \pi/a, \pi/a)$.

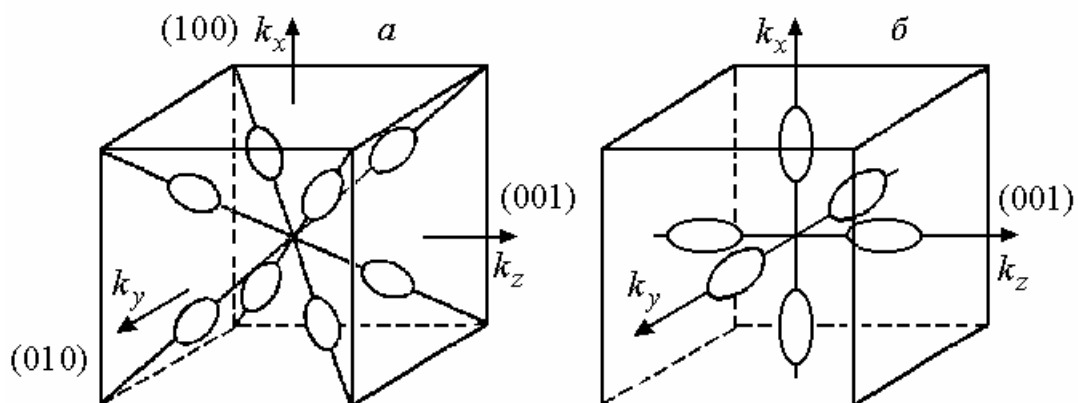


Рис. 2.19. Долины зоны проводимости в полупроводниках с кубической гранецентрированной решеткой Браве.

a – долины зоны проводимости Ge (а также, например, PbTe); они расположены на границе показанной на рис. 2.18, \mathcal{b} зоны Бриллюэна, в L-точках на осях типа (111) . \mathcal{b} – долины зоны проводимости Si; они расположены в Δ -точках на

расстоянии $\sim 0,85 \cdot 2\pi/a$ от центра Г зоны Бриллюэна. Долины изображены в форме поверхностей постоянной энергии в \mathbf{k} -пространстве, внутри ячейки обратной решетки (их пропорции на рисунках не соблюдены). В квадратичном приближении (2.292) каждая долина имеет вид эллипсоида с центром в соответствующей точке $\mathbf{k}_{0,m}$. Так как направления типа (111) или (100) являются осями симметрии, соответственно, третьего или четвертого порядка, расположенные на них эллипсоиды есть эллипсоиды вращения.

Как и выше, ограничимся рассмотрением резких гетеропереходов, образованных однородными слоями сходных материалов А и В. В случае сходных материалов базисные блоховские амплитуды $|u_{n,\mathbf{k}_{0,m}}\rangle$ в А и В допустимо считать одинаковыми; это позволяет воспользоваться методом огибающих функций. Придерживаясь самого простого подхода, пренебрежем взаимодействием между долинами и расщеплением энергетического спектра (возможным в силу ряда причин, включая механические напряжения или отсутствие центра инверсии в несимметричных структурах). В таком приближении электронные состояния в различных долинах испытывают размерное квантование независимо друг от друга – в квантовой яме каждая долина порождает свою серию размерно-квантованных подзон, двукратно вырожденных по спину. При симметричном расположении нормали интерфейсов (ось z) относительно направлений долин их серии размерно-квантованных уровней энергии (краев подзон) должны совпадать друг с другом.

Предполагая, как и в предыдущих примерах, что гетероструктура однородна в направлениях x, y , огибающую функцию $f(\mathbf{r})$ электрона с заданным состоянием спина в произвольно взятой (m -ой) долине ищем в виде (1.27):

$$f(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} \psi(z), \quad (2.293)$$

где волновой вектор в плоскости слоев гетероструктуры

$$\mathbf{K} = k_x \mathbf{e}_x + k_y \mathbf{e}_y \quad (2.294)$$

отсчитывается от центра долины $\mathbf{k}_{0,m}$. В каждом слое волновую функцию (2.293) следует подчинить однозонному уравнению Шредингера с гамильтонианом, который получается из $k\rho$ -гамильтониана (2.292) заменой $\mathbf{k} \rightarrow -i\nabla$ и $E_c \rightarrow U(z)$. Подставив в такое уравнение выражение (2.293), получим уравнение для огибающей функции $\psi(z)$:

$$\hat{H}(z, \hat{k}_z) \psi(z) = E \psi(z), \quad (2.295)$$

где $\hat{k}_z = -id/dz$ и

$$\hat{H}(z, \hat{k}_z) = \frac{\hbar^2}{2} \left((m^{-1})_{zz} \hat{k}_z^2 + 2 \sum_j (m^{-1})_{jz} K_j \hat{k}_z + \sum_i \sum_j (m^{-1})_{ij} K_i K_j \right) + U(z). \quad (2.296)$$

Суммирование ведется по двум значениям индексов ($i, j = x, y$), так как волновой вектор \mathbf{K} (2.294) может иметь лишь две ненулевые компоненты.

Простые граничные условия на интерфейсах гетероструктуры легко получить, подчинив $\psi(z)$ требованию непрерывности, перейдя в уравнении (2.295) к симметризованным операторам дифференцирования

$$(m^{-1})_{zz} \hat{k}_z^2 \rightarrow \hat{k}_z (m^{-1})_{zz} \hat{k}_z, \quad (m^{-1})_{jz} \hat{k}_z \rightarrow (1/2)(\hat{k}_z (m^{-1})_{jz} + (m^{-1})_{jz} \hat{k}_z),$$

и интегрируя получившееся уравнение в окрестности гетерограницы. Такой же результат дают условия вида:

$$\psi|_A = \psi|_B, \quad (2.297, a)$$

$$\hat{V}_z \psi|_A = \hat{V}_z \psi|_B, \quad (2.297, б)$$

где

$$\hat{V}_z = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial \hat{H}(z, \hat{k}_z)}{\partial \hat{k}_z} = (m^{-1})_{zz} \left(-i \frac{d}{dz} \right) + \sum_{j=x,y} (m^{-1})_{jz} K_j \equiv (m^{-1})_{zz} (\hat{k}_z + p). \quad (2.298)$$

Здесь введено обозначение:

$$p = \frac{\sum_{j=x,y} (m^{-1})_{jz} K_j}{(m^{-1})_{zz}}. \quad (2.299)$$

Следуя рассмотрению Стерна [18], сделаем в (2.295)–(2.296) подстановку $\psi(z) = \zeta(z) \exp(i\alpha z)$ и подберем параметр α так, чтобы исключить члены с первыми производными по z . Для этого надо положить $\alpha = -p$:

$$\psi(z) = \zeta(z) \exp(-ipz). \quad (2.300)$$

Тогда для функции $\zeta(z)$ в каждом слое гетероструктуры получим уравнение, по форме совпадающее с обычным уравнением Шредингера с обратной массой частицы, равной $(m^{-1})_{zz}$:

$$-\frac{\hbar^2}{2} (m^{-1})_{zz} \frac{d^2 \zeta}{dz^2} + U(z) \zeta = E^{(z)} \zeta. \quad (2.301)$$

В этом уравнении переменная $E^{(z)}$ связана с энергией электрона E формулой:

$$E = E^{(z)} + E^{(xy)}(\mathbf{K}), \quad (2.302)$$

где

$$E^{(xy)}(\mathbf{K}) = \frac{\hbar^2}{2} \left(\sum_{i,j=x,y} \sum (m^{-1})_{ij} K_i K_j - \frac{(\sum_{j=x,y} (m^{-1})_{jz} K_j)^2}{(m^{-1})_{zz}} \right). \quad (2.303)$$

Выполняя указанное в (2.303) суммирование и вводя обозначения

$$\begin{aligned} (\mu^{-1})_{xx} &= (m^{-1})_{xx} - \frac{(m^{-1})_{xz}^2}{(m^{-1})_{zz}}, & (\mu^{-1})_{yy} &= (m^{-1})_{yy} - \frac{(m^{-1})_{yz}^2}{(m^{-1})_{zz}}, \\ (\mu^{-1})_{xy} &= (\mu^{-1})_{yx} = (m^{-1})_{xx} - \frac{(m^{-1})_{xz} (m^{-1})_{yz}}{(m^{-1})_{zz}}, \end{aligned} \quad (2.304)$$

можно представить выражение (2.303) в виде:

$$E^{(xy)}(\mathbf{K}) = \frac{\hbar^2}{2} \left((\mu^{-1})_{xx} k_x^2 + 2(\mu^{-1})_{xy} k_x k_y + (\mu^{-1})_{yy} k_y^2 \right). \quad (2.305)$$

Обсудим характер решений задачи (2.301)–(2.305) на простых примерах.

2.6.2. Прямоугольная бесконечная яма с анизотропной зоной проводимости

В модели 2D-системы с бесконечной прямоугольной потенциальной ямой потенциал $U(z)$ в уравнениях (2.295)–(2.296) и (2.301) можно положить равным нулю, а волновую функцию $\psi(z)$ надо подчинить условиям обращения в нуль на границах ямы ($z=0$ и $z=d$). Тогда, как видно из формулы (2.300), таким же граничным условиям должны удовлетворять и решения $\zeta(z)$ уравнения (2.301):

$$\zeta(0) = 0, \quad \zeta(d) = 0. \quad (2.306)$$

Вспоминая известное решение аналогичной задачи (1.17), приходим к выводу, что значения переменной $E^{(z)}$ в (2.301) квантуются точно так же, как энергия частицы с обратной эффективной массой $(m^{-1})_{zz}$. При этом серия подзон размерного квантования, возникающая в рассматриваемой долине зоны проводимости, описывается в соответствии с (2.302) формулой:

$$E_n(\mathbf{K}) = (m^{-1})_{zz} \frac{\pi^2 \hbar^2}{2d^2} n^2 + E^{(xy)}(\mathbf{K}), \quad n = 1, 2, 3, \dots, \quad (2.307)$$

где $E^{(xy)}(\mathbf{K})$ определяется соотношениями (2.305) и (2.304), d – ширина квантовой ямы.

Для примера рассмотрим энергетические подзоны (2.307), образующиеся в квантовой яме с шестидолинной зоной проводимости кремния (рис. 2.19, б).

В общем случае нормаль к плоским границам квантовой ямы может быть произвольно ориентирована по отношению к осям кристалла (100), (010), (001). Тогда каждая пара долин, лежащих на осях (100), (010), (001), даст отдельную серию подзон (2.307). Результирующий спектр энергии будет содержать три серии двукратно вырожденных (без учета спина) подзон $E_n(\mathbf{K})$, порожденных указанными парами долин. При количественном расчете уровней размерного квантования по формулам (2.304)–(2.305) и (2.307) следует сначала для каждой долины-эллипсоида найти компоненты тензора обратной эффективной массы $(m^{-1})_{ij}$ в системе координат квантовой ямы (с осями $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$), исходя из того, что в системе главных осей (с осями $\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2, \mathbf{n}_3$) тензор обратной эффективной массы $(m^{-1})_{ij}^{diag}$ имеет диагональный вид со значениями $1/m_l, 1/m_t, 1/m_t$ на главной диагонали. Здесь m_l и m_t есть объемные значения, соответственно, продольной (longitudinal) и поперечной (transverse) эффективной массы электрона в данной долине, имеющей форму эллипсоида вращения. Преобразование компонент тензора второго ранга $(m^{-1})_{ij}^{diag}$ к осям $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$ выполняется по формулам

$$(m^{-1})_{ij} = \sum_r \sum_{s=1,2,3} T_{ir} T_{js} (m^{-1})_{rs}^{diag} = \frac{1}{m_l} T_{i1} T_{j1} + \frac{1}{m_t} (T_{i2} T_{j2} + T_{i3} T_{j3}), \quad (2.308)$$

где величина $T_{ir} \equiv \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{n}_r$ равна косинусу угла между нормированными на единицу осями \mathbf{e}_i и \mathbf{n}_r . Из выражения (2.307) видно, что самый нижний размерно-квантованный уровень энергии принадлежит той серии подзон, которой соответствует наибольшее значение $(m^{-1})_{zz}$.

В типичном случае слои наноструктуры выращивают в одном из направлений, эквивалентных направлению (001). Можно считать, что в такой наноструктуре орт нормали \mathbf{e}_z параллелен оси (001), как показано на рис. 2.18–2.19. Для пары эллипсоидов слоя n-Si(001), лежащих на оси k_z , выполняются равенства $\mathbf{n}_1 = \mathbf{e}_z, \mathbf{n}_2 = \mathbf{e}_x, \mathbf{n}_3 = \mathbf{e}_y$. Следовательно, тензор $(m^{-1})_{ij}$ в каждой из этих двух долин диагонален, причем

$$(m^{-1})_{zz} = 1/m_l, \quad (m^{-1})_{xx} = (m^{-1})_{yy} = 1/m_t. \quad (2.309)$$

С учетом (2.309) выражение (2.305) принимает вид

$$E^{(xy)}(\mathbf{K}) = \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{k_x^2}{m_t} + \frac{k_y^2}{m_t} \right) = \frac{\hbar^2 K^2}{2m_t}. \quad (2.310)$$

Этому выражению можно сопоставить рисунок, изображающий на плоскости с координатами k_x, k_y контур (линию) $E^{(xy)}(\mathbf{K}) = \text{const}$; такой контур будет иметь вид окружности с центром в начале координат.

Для пары эллипсоидов, лежащих на оси k_x , выполняются равенства $\mathbf{n}_1 = \mathbf{e}_x, \mathbf{n}_2 = \mathbf{e}_y, \mathbf{n}_3 = \mathbf{e}_z$. У каждого из этих эллипсоидов тензор $(m^{-1})_{ij}$ также диагонален, но теперь компонента $(m^{-1})_{zz}$ определяется поперечной эффективной массой электрона:

$$(m^{-1})_{zz} = (m^{-1})_{yy} = 1/m_t, \quad (m^{-1})_{xx} = 1/m_l. \quad (2.311)$$

При отсчете вектора \mathbf{K} от центра зоны Бриллюэна следует в (2.305) заменить k_x величиной $(k_x \mp k_{0,x})$, где $\mp k_{0,x}$ – координаты Δ -точек на оси k_x , в которых находятся центры рассматриваемых двух долин:

$$E^{(xy)}(\mathbf{K}) = \frac{\hbar^2 (k_x \mp k_{0,x})^2}{2m_l} + \frac{\hbar^2 k_y^2}{2m_t}. \quad (2.312)$$

Здесь минус берется для эллипсоида на положительной полуоси k_x , плюс – на отрицательной.

Аналогичным образом для пары эллипсоидов на оси k_y получим:

$$(m^{-1})_{zz} = (m^{-1})_{xx} = 1/m_t, \quad (m^{-1})_{yy} = 1/m_l, \quad (2.313)$$

$$E^{(xy)}(\mathbf{K}) = \frac{\hbar^2 k_x^2}{2m_t} + \frac{\hbar^2 (k_y \mp k_{0,y})^2}{2m_l}. \quad (2.314)$$

В долинах зоны проводимости кремния $m_l = 0,916 m_0, m_t = 0,19 m_0$, то есть $m_l > m_t$. В этом случае подзону с наименьшим уровнем энергии дает пара долин на оси k_z , перпендикулярной к плоскости квантовой ямы; подзоны этой серии двукратно вырождены (без учета спина) и

описываются формулами (2.307), (2.309)–(2.310). Остальные две пары долин порождают серию четырехкратно вырожденных (без учета спина) подзон (2.307) с $(m^{-1})_{zz} = 1/m_t$, состоящих из анизотропных энергетических ветвей (2.312) и (2.314). Анизотропия энергетических ветвей иллюстрируется картиной контуров постоянной энергии $E^{(xy)}(\mathbf{K}) = \text{const}$ на плоскости с координатами k_x, k_y – такие контуры имеют вид эллипсов (см. рис. 2.20, *a*).

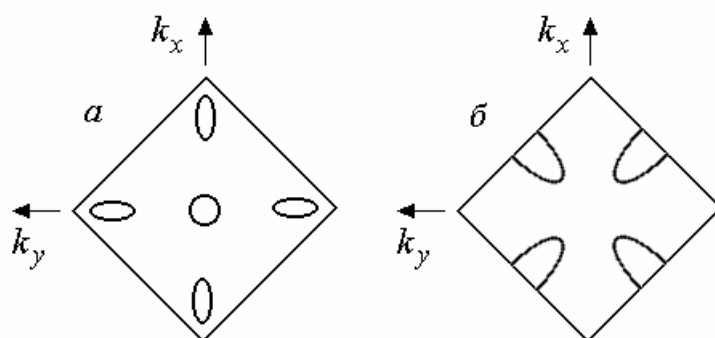


Рис. 2.20. Анизотропия и многодолинная структура подзон размерного квантования.

a – окружность и эллипсы представляют линии постоянной энергии $E^{(xy)}(\mathbf{K}) = \text{const}$ для подзон размерного квантования в квантовой яме типа n-Si (001). Окружность соответствует подзоне в двух долинах на оси k_z параллельной направлению роста наноструктуры (001). Эллипсы соответствуют подзонам в четырех долинах с центрами на осях k_x и k_y . *б* – линии постоянной энергии $E^{(xy)}(\mathbf{K}) = \text{const}$ для подзон размерного квантования в квантовой яме типа n-Ge (001). Оба рисунка схематичны, пропорции контуров не выдержаны. Вершины квадратов соответствуют X-точкам трехмерной зоны Бриллюэна, лежащим в плоскости k_x, k_y .

Рассмотрим подобным же образом энергетические подзоны (2.307), возникающие в квантовой яме с четырехдолинной зоной проводимости слоя n-Ge (001). На рис. 2.19, *a* изображено восемь эллипсоидов, но внутри первой зоны Бриллюэна находятся лишь их половинки, что эквивалентно присутствию в первой зоне Бриллюэна четырех целых эллипсоидов.

Пусть нормаль \mathbf{e}_z к плоским интерфейсам квантовой ямы параллельна оси (001). В этом случае на шкале энергии образуется единственная серия четырехкратно вырожденных подзон, так как все долины ориентированы относительно (001) под одним и тем же углом. Для

эллипсоида с центром в L-точке на оси (111) нормированные орты системы главных осей можно записать в виде

$$\mathbf{n}_1 = \frac{1}{\sqrt{3}}(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z), \quad \mathbf{n}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{e}_y - \mathbf{e}_z), \quad \mathbf{n}_3 = \frac{1}{\sqrt{6}}(-2\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z). \quad (2.315)$$

Отметим, что вместо указанных здесь ортов \mathbf{n}_2 , \mathbf{n}_3 можно взять любую пару ортов в плоскости, перпендикулярной к \mathbf{n}_1 , так как речь идет о главных осях эллипсоида вращения. Вычисление тензора обратной эффективной массы (2.308) приводит к следующему результату:

$$(m^{-1})_{zz} = (m^{-1})_{yy} = (m^{-1})_{xx} = \frac{m_t + 2m_l}{3m_t m_l}, \quad (2.316)$$

$$(m^{-1})_{xy} = (m^{-1})_{xz} = (m^{-1})_{yz} = \frac{m_t - m_l}{3m_t m_l}. \quad (2.317)$$

Дискретная составляющая размерно-квантованного спектра энергии (2.307) определяется величиной (2.316), а непрерывная часть (2.305) – симметричной матрицей (μ^{-1}) размером 2×2 с элементами (2.304):

$$\left(\mu^{-1} \right) = \begin{pmatrix} M & N \\ N & M \end{pmatrix}, \quad \text{где} \quad M = \frac{m_l + 2m_t}{m_t(m_t + 2m_l)}, \quad N = \frac{m_t - m_l}{m_t(m_t + 2m_l)}. \quad (2.318)$$

Собственные векторы матрицы (μ^{-1}) указывают направление главных осей эллипса $E^{(xy)}(\mathbf{K}) = \text{const}$ на плоскости k_x, k_y . Собственные значения $1/\mu_1$ и $1/\mu_2$ матрицы (μ^{-1}) определяют величины полуосей эллипса – большему значению μ_i отвечает большая полуось. В нашем примере

$$1/\mu_1 = M + N, \quad 1/\mu_2 = M - N,$$

так что

$$\mu_1 = \frac{1}{3}(m_t + 2m_l), \quad \mu_2 = m_t. \quad (2.319)$$

Собственному значению $M + N$ матрицы (2.318) принадлежит собственный вектор с компонентами $k_x = k_y$, а собственному значению $M - N$ отвечает собственный вектор $k_x = -k_y$, то есть главные оси рассматриваемого эллипса повернуты на угол $\pi/4$ относительно осей k_x, k_y . Осталось узнать, вдоль какой из двух главных осей эллипс вытянут (или сжат). В долинах зоны проводимости германия $m_l = 1,59 m_0$, $m_t = 0,082 m_0$, так что формулы (2.319) дают $\mu_1 > \mu_2$ и, следовательно, рассматриваемый эллипс вытянут в направлении $k_x = k_y$. Аналогично определяется ориентация остальных трех эллипсов; итоговая картина схематично изображена на рис. 2.20, б.

При вычислении плотности состояний $g(E)$ в заданной серии подзон с анизотропной квадратичной \mathbf{K} -зависимостью энергии (2.305) удобно ввести представление об *эффективной массе плотности состояний*. Действительно, интеграл для плотности состояний, аналогичный (1.218), можно записать в координатах k_1, k_2 , получающихся поворотом координат k_x, k_y при диагонализации матрицы (μ^{-1}) коэффициентов квадратичной формы $E^{(xy)}(\mathbf{K})$:

$$g(E) = \frac{2}{S} \sum_n \sum_{k_y} \sum_{k_x} \delta(E - E_n(\mathbf{K})) = 2 \sum_n \int \frac{dk_1 dk_2}{(2\pi)^2} \delta(E - E_n(k_1, k_2)), \quad (2.320)$$

где

$$E_n(k_1, k_2) = E_n + \frac{\hbar^2 k_1^2}{2\mu_1} + \frac{\hbar^2 k_2^2}{2\mu_2}. \quad (2.321)$$

Перейдем к переменным $q_i = k_i / \sqrt{\mu_i}$ и затем – к полярным координатам на плоскости q_1, q_2 с радиальной переменной $Q = (q_1^2 + q_2^2)^{1/2}$:

$$\int dk_1 dk_2 \dots = (\mu_1 \mu_2)^{1/2} \int dq_1 dq_2 \dots = (\mu_1 \mu_2)^{1/2} \int_0^\infty 2\pi Q dQ \dots \quad (2.322)$$

В результате получим выражение (1.220) с массой плотности состояний m вида

$$m = (\mu_1 \mu_2)^{1/2}, \quad (2.323)$$

то есть

$$g(E) = \sum_n \frac{(\mu_1 \mu_2)^{1/2}}{\pi h^2} \theta(E - E_n). \quad (2.324)$$

В рассмотренных выше примерах: $m = m_t$ для (2.310), $m = (m_t m_l)^{1/2}$ для (2.312) и (2.314), а для каждой из четырех серий подзон, соответствующих рис. 2.20, б, в формулу (2.323) следует подставить величины (2.319). Полная плотность состояний равна сумме вкладов (2.324) от каждой серии подзон в конкретной квантовой яме.

2.6.3. Инверсионный слой в кремнии *p*-типа

Изложенный подход к учету анизотропии тензора эффективной массы был развит уже в ранних работах по размерному квантованию, в основном, в связи с изучением МДП-структур (см. обзор [18]). Пример МДП-системы показан на рис. 1.1, б: под действием положительного электрического напряжения, приложенного к металлической обкладке структуры, в полупроводниковом материале *p*-типа образуется область с электронным типом проводимости – инверсионный слой. Одним из наиболее широко применяемых материалов служит кремний; его зона проводимости обладает многодолинным строением, показанным на рис. 2.19, б.

Потенциальный рельеф $U(z)$ инверсионного слоя, очевидно, не имеет вида бесконечной прямоугольной ямы. Он не совпадает точно ни с треугольным потенциалом (1.80), ни с экспоненциальным (1.87), и в действительности должен определяться самосогласованным образом – с учетом результирующей плотности заряда электронов, локализующихся в потенциальной яме $U(z)$. Несмотря на то, что заранее потенциал $U(z)$ неизвестен, бесконечно высокая потенциальная стенка в области диэлектрика ($z < 0$) считается неплохим приближением, то есть граничное условие $\psi(0) = 0$ является приемлемым. В глубине полупроводника при любой форме потенциальной ямы $U(z)$ граничное условие имеет вид $\psi(+\infty) = 0$. Тогда для волновой функции $\zeta(z)$, связанной с $\psi(z)$ соотношением (2.300), применимы подобные же граничные условия:

$$\zeta(0) = 0, \quad \zeta(z)|_{z \rightarrow \infty} = 0. \quad (2.325)$$

В таком подходе размерно-квантованный спектр энергии электронов инверсионного слоя Si(001) описывается формулой, аналогичной (2.307):

$$E_{n,m}(\mathbf{K}) = E_{n,m} + E_m^{(xy)}(\mathbf{K}), \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.326)$$

где m – номер долины, $E_{n,m}$ – уровни размерного квантования, определяемые в процессе самосогласованного решения уравнения Шредингера (2.301) с величиной $(m^{-1})_{zz}$ для движения электрона вдоль z в m -ой долине, $E_m^{(xy)}(\mathbf{K})$ – непрерывная составляющая энергии, обусловленная движением электрона в плоскости x, y в m -ой долине. Разделение дискретного и непрерывного вкладов в энергию связано с простотой граничных условий (2.325). При этом форма потенциала $U(z)$ определяет только дискретную составляющую энергии $E_{n,m}$ (и волновые функции $\zeta(z)$). Непрерывная составляющая энергии имеет вид (2.305), для слоя n-Si(001) она иллюстрируется рассмотренным выше рисунком 2.20, а.

Уровни энергии $E_{n,m}$ для нижней серии подзон, включающей состояние с наименьшей энергией, иногда обозначают как E_0, E_1, \dots , а следующую серию подзон – как $E_{0'}, E_{1'}, \dots$. Численные расчеты показывают [18], что для инверсионного слоя n-Si(001) характерно приближительное равенство $E_{0'} \approx E_1$.

2.6.4. Структуры с барьерами конечной высоты

К системам, обладающим многодолинной зоной проводимости, относятся также наноструктуры с переходами Si/Si_{1-x}Ge_x, PbTe/Pb_{1-x}Sn_xTe и ряд других. При относительно малом содержании Ge расположение долин в \mathbf{k} -пространстве в материалах Si_{1-x}Ge_x и Si почти одинаково, но механическое напряжение в деформированном слое приводит к отщеплению на шкале энергии двух долин, ориентированных параллельно

направлению роста (001), от остальных четырех долин. Слой Si представляет для электронов квантовую яму с высотой барьеров, зависящей от содержания Ge в материале $\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x$, окружающем этот слой.

В случае барьеров конечной высоты граничные условия (2.306) неприменимы; вместо них мы можем воспользоваться условиями (2.297). В терминах волновой функции $\zeta(z)$, связанной с огибающей функцией $\psi(z)$ в m -ой долине соотношением (2.300), условия (2.297) принимают вид:

$$e^{-ipz}\zeta(z)|_A = e^{-ipz}\zeta(z)|_B, \quad (2.327, a)$$

$$e^{-ipz}(m^{-1})_{zz}\frac{d\zeta}{dz}\Big|_A = e^{-ipz}(m^{-1})_{zz}\frac{d\zeta}{dz}\Big|_B, \quad (2.327, б)$$

где p определяется формулой (2.299).

В моделях наноструктур с кусочно-постоянным потенциалом $U(z) = E_c(z)$ частные решения $\zeta(z)$ уравнения Шредингера (2.301) в каждом однородном слое имеют вид $\exp(\pm i k z)$, где, с учетом (2.302)–(2.303),

$$k(E, \mathbf{K}) = \sqrt{\frac{2}{\hbar^2(m^{-1})_{zz}}(E - E^{(xy)}(\mathbf{K}) - E_c)}. \quad (2.328)$$

Входящие в это выражение компоненты тензора обратной эффективной массы электрона и уровень края зоны проводимости E_c в m -ой долине являются кусочно-постоянными функциями координаты z , или, другими словами, функциями номера слоя n . Общее решение $\zeta(z)$ в слое с номером n запишется в форме линейной комбинации двух частных решений:

$$\zeta(z)|_{z_{n-1} < z < z_n} = A_n \exp(ik_n z) + B_n \exp(-ik_n z). \quad (2.329)$$

Если представить это решение в виде столбца

$$v_n(z) = \begin{pmatrix} \tilde{a}_n(z) \\ \tilde{b}_n(z) \end{pmatrix} \quad (2.330)$$

с компонентами

$$\tilde{a}_n(z) = \sqrt{k_n(m_n^{-1})_{zz}} A_n e^{ik_n z - ip_n z}, \quad \tilde{b}_n(z) = \sqrt{k_n(m_n^{-1})_{zz}} B_n e^{-ik_n z - ip_n z}, \quad (2.331)$$

то граничные условия (2.327) можно выразить в форме, аналогичной (1.170):

$$v_n(z_n) = \hat{t}^{(n,n+1)} v_{n+1}(z_n). \quad (2.332)$$

Здесь элементы матрицы $\hat{t}^{(n,n+1)}$, как и в (1.171), определяются формулами

$$t_{11}^{(n,n+1)} = t_{22}^{(n,n+1)} = \frac{1}{2} \left(\alpha^{n,n+1} + \frac{1}{\alpha^{n,n+1}} \right),$$

$$t_{12}^{(n,n+1)} = t_{21}^{(n,n+1)} = \frac{1}{2} \left(\alpha^{n,n+1} - \frac{1}{\alpha^{n,n+1}} \right),$$

где

$$\alpha^{n,n+1} = \sqrt{\frac{k_n(m_n^{-1})_{zz}}{k_{n+1}(m_{n+1}^{-1})_{zz}}}. \quad (2.333)$$

Диагональная матрица $\hat{t}^{(n,n)}$ будет отличаться от (1.175) лишь наличием множителя $\exp(ip_n(z_n - z_{n-1}))$. Отсюда видно, что дисперсионные уравнения в однозонном приближении для заданных долин в слоистых гетероструктурах можно строить методом матриц переноса, обсуждавшимся в разделе 1.5; анизотропия долин учитывается выражениями (2.328) и (2.299) для волнового вектора и для величины p .

Пример расчета указанным методом минизон в (111)-долине сверхрешетки $\text{PbTe} \setminus \text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ приведен на рис. 2.21 (в сравнении с результатом двухзонного расчета из работы [22]). Точность однозонного расчета невелика; на практике чаще применяют более надежные методы, такие как метод сильной связи.

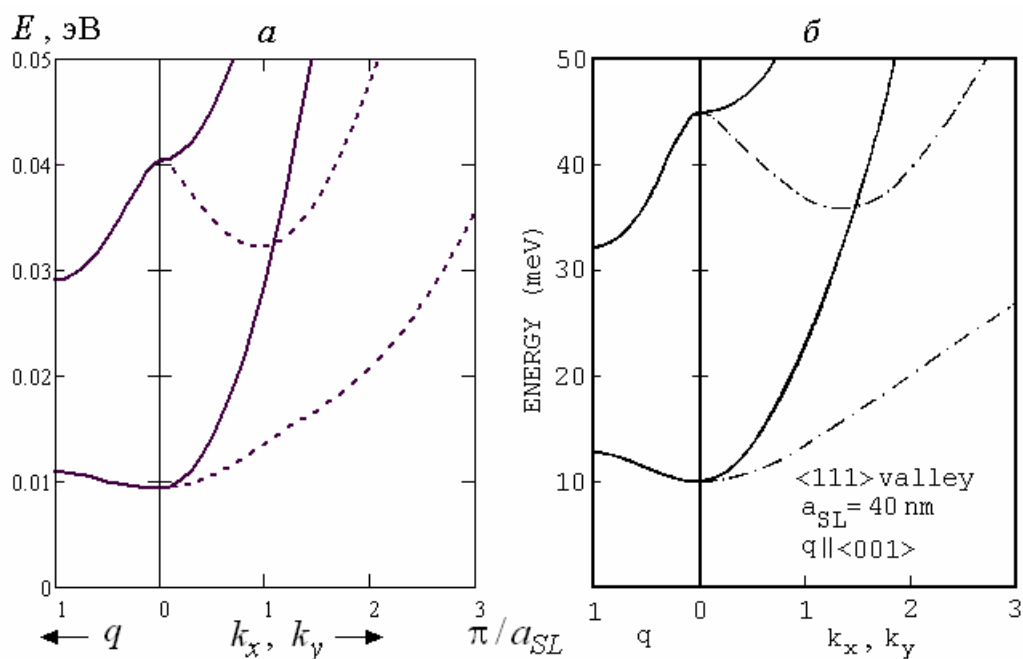


Рис. 2.21. Минизоны в анизотропной долине зоны проводимости. *a* – две нижние минизоны в долине типа (111) зоны проводимости сверхрешетки, образованной $\text{Pb}_{0,88}\text{Sn}_{0,12}\text{Te}$ (материал А, квантовая яма, $E_c = 0$) и PbTe (материал В, барьер). Направление нормали к слоям – (001). Расчет выполнен в однозонной параболической модели изложенным выше методом с параметрами: $m_l = 0,24 m_0$, $m_t = 0,024 m_0$ (как для А, так и для В), $W = 0,03$ эВ – высота барьера, $l = 200 \text{ \AA}$ – ширина барьера, $d = 200 \text{ \AA}$ – ширина квантовой ямы, $a_{SL} = l + d = 400 \text{ \AA}$ – период сверхрешетки. Жирные линии в левой части рисунка представляют закон дисперсии минизон $E_n(q, k_x, k_y)$ для направления квазиволнового вектора q вдоль (001) при $k_x = k_y = 0$, а в правой части рисунка – при $q = 0$, $k_x = -k_y \neq 0$; штриховые линии – при $q = 0$, $k_x = k_y \neq 0$. *б* – аналогичные данные из работы [22] (обозначения изменены), полученные в анизотропной двухзонной $k\mathbf{p}$ -модели с учетом механических напряжений слоев сверхрешетки; эта модель включает непараболическость энергетического спектра электронов и дырок, свойственную материалам IV–VI. Видно, что данные рисунков *a* и *б* качественно близки.

2.7. НАПРЯЖЕННЫЕ ГЕТЕРОСТРУКТУРЫ

В этом разделе мы рассмотрим характер изменений в электронном энергетическом спектре, которые привносятся упругой деформацией, возникающей в слоях наноструктуры из-за рассогласования постоянных решетки материалов А и В.

При выращивании слоя А сравнительно малой толщины на толстой кристаллической подложке В энергетически выгодным оказывается такое расположение атомов материала А, которое в плоскости подложки воспроизводит кристаллическую структуру подложки В. Другими словами, ориентация кристалла А с малой толщиной и его межатомные расстояния в направлениях, параллельных подложке, будут такими же, как в подложке В. Слой А в этом случае называют псевдоморфным. Несмотря на то, что А и В – сходные материалы, они могут различаться объемным значением постоянной решетки: $a_A \neq a_B$. При значительном рассогласовании постоянных решетки следует учитывать, что псевдоморфный слой испытывает механические напряжения, параллельные плоскости подложки, и поэтому он оказывается деформированным (однородно): если в объемных кристаллах $a_A > a_B$, то слой А, подстраиваясь под структуру подложки, сжимается вдоль плоскости подложки, если $a_A < a_B$, то – растягивается. Из наглядных представлений легко понять, что деформация слоя А возникает и в направлении нормали к подложке, хотя механическое напряжение в этом направлении может быть равно нулю: если вдоль подложки слой растягивается, то в поперечном направлении он становится тоньше, и наоборот.

Чем толще однородный деформированный слой, тем больше его энергия упругой деформации. При достаточно большой толщине слоя энергетически выгодным становится одно из возможных неоднородных состояний [20], например, – имеющее вид островков материала А на поверхности или внутри материала В.

Ниже мы ограничимся рассмотрением однородного, псевдоморфного слоя А, окруженного недеформированным материалом В. Наша цель состоит в том, чтобы проиллюстрировать способ описания упругой деформации слоя А и метод учета деформации в kr -гамильтониане гетроструктуры, а также мы кратко обсудим такое проявление деформации, как пьезоэлектрический эффект. Следует отметить, что с практической точки зрения больший интерес представляют сверхрешетки, а не одиночные структуры В\А\В. В композиционной сверхрешетке (образованной различающимися материалами А и В) со значительным рассогласованием постоянных решетки напряженными оказываются слои

обоих материалов. Деформация в слоях сверхрешетки А и В различна по величине (и по знаку), так как она зависит от соотношения толщин слоев и от значений упругих постоянных материалов. В результате, изменяя состав твердых растворов А и В, толщину слоев, а также направление роста сверхрешетки относительно кристаллографических осей, можно целенаправленно задавать величину и характер деформации слоев сверхрешетки. Тем самым деформация используется в качестве средства управления физическими свойствами напряженной гетероструктуры.

2.7.1. Тензор упругой деформации псевдоморфного слоя

Упругая деформация среды количественно характеризуется симметричным тензором второго ранга $u_{ij} = u_{ji}$ – тензором деформации [19]. Для симметричного тензора второго ранга всегда найдется такая система ортогональных координат (главные оси тензора), в которой он приводится к диагональному виду. В этой системе координат диагональные компоненты тензора деформации имеют очень простой смысл: $u_{\alpha\alpha} \equiv u_{\alpha}$ есть относительное изменение длины элемента среды в направлении α -ой главной оси, причем вся деформация представляется как результат трех независимых удлинений (или сжатий) элемента среды вдоль главных осей тензора деформации. Здесь и далее предполагается, что деформация мала: $|u_{ij}| \ll 1$.

Прежде всего найдем связь между тензором деформации и изменениями $\delta \mathbf{a}_l$ ($l = 1, 2, 3$) базисных векторов решетки Браве, возникающими при деформации. Пусть $\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2, \mathbf{n}_3$ – единичные орты главных осей тензора деформации u_{ij} . Если изменение $\delta \mathbf{a}$ произвольного достаточно малого вектора \mathbf{a} разложить по ортам \mathbf{n}_{α} , то коэффициентами разложения будут изменения δa_{α} составляющих вектора \mathbf{a} в направлениях главных осей, равные произведению составляющей вектора a_{α} и главного значения тензора деформации u_{α} – в соответствии с указанным выше физическим смыслом u_{α} . Поэтому:

$$\delta \mathbf{a} = \sum_{\alpha=1,2,3} a_{\alpha} u_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} = \sum_{\alpha=1,2,3} a_{\alpha} \hat{u} \mathbf{n}_{\alpha} = \sum_{\alpha=1,2,3} \hat{u} a_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} = \hat{u} \mathbf{a}. \quad (2.334)$$

Правая сторона в этой цепочке равенств получена с учетом того, что \mathbf{n}_{α} есть собственный вектор для матрицы \hat{u} , представляющей тензор деформации:

$$\hat{u} \mathbf{n}_{\alpha} = u_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha}, \quad (2.335)$$

причем

$$\sum_{\alpha=1,2,3} a_{\alpha} \mathbf{n}_{\alpha} = \mathbf{a}.$$

Таким образом, деформированный вектор \mathbf{a}' записывается в виде

$$\mathbf{a}' = \mathbf{a} + \hat{u} \mathbf{a}. \quad (2.336)$$

В компонентной форме по отношению к произвольной системе координат с ортами $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$ равенство (2.336) принимает вид соотношений

$$a'_i = a_i + \sum_{j=x,y,z} u_{ij} a_j, \quad i = x, y, z. \quad (2.337)$$

Эти соотношения применимы, в том числе, к каждому из трех базисных векторов решетки Браве \mathbf{a}_l .

При изучении кубических кристаллов обычно в качестве осей системы координат x, y, z выбирают кристаллографические направления (100), (010), (001) (см. рис. 2.18), поскольку в таких координатах легко учесть влияние симметрии кристалла на структуру всех его материальных тензоров. В случае роста псевдоморфного слоя А в одном из направлений (100), (010), (001) (для определенности пусть речь идет о направлении (001)) орты $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z$ указанной системы координат в то же время задают ориентацию слоя А: \mathbf{e}_z – нормаль к плоскости слоя, $\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y$ – направления в плоскости слоя. Однако в общем случае, при произвольном направлении роста слоя, следует ввести в дело еще три единичных орта – нормаль к плоскости слоя \mathbf{N}_3 и два взаимно ортогональных направления в плоскости слоя $\mathbf{N}_2, \mathbf{N}_1$.

Условие псевдоморфности слоев А и В в сверхрешетке сводится к тому, что проекции деформированных базисных векторов решетки Браве на плоскость слоев должны быть одинаковыми в обоих слоях А и В [21]:

$$\mathbf{a}'_l|_A \cdot \mathbf{N}_1 = \mathbf{a}'_l|_B \cdot \mathbf{N}_1, \quad \mathbf{a}'_l|_A \cdot \mathbf{N}_2 = \mathbf{a}'_l|_B \cdot \mathbf{N}_2, \quad l = 1, 2, 3. \quad (2.338)$$

Соотношения (2.338) составляют часть системы уравнений для тензоров деформации u_{ij}^A и u_{ij}^B в слоях А и В. Другая часть системы уравнений для обоих тензоров деформации возникает из условия минимальности энергии упругой деформации.

Напомним, что объемная плотность энергии упругой деформации в однородном кристалле в квадратичном приближении по компонентам тензора деформации записывается в форме

$$U_{деф} = \frac{1}{2} \sum_i \sum_j \sum_k \sum_n C_{ijkn} u_{ij} u_{kn}. \quad (2.339)$$

Это выражение представляет собой первый не исчезающий член разложения $U_{деф}$ в ряд по степеням u_{ij} ; разложение начинается со второй степени, так как величины u_{ij} могут иметь любой знак, но плотность энергии $U_{деф}$ не может быть отрицательной. Коэффициенты разложения C_{ijkn} составляют тензор четвертого ранга, называемый тензором упругих постоянных (или тензором модулей упругости). Для ясности в нашем тексте сохранены все знаки суммирования, хотя в литературе принято опускать знаки суммирования по дважды повторяющимся тензорным индексам. Тензор деформации часто обозначают как ε_{ij} , а тензор напряжений (см. ниже) как σ_{ij} .

Поскольку в (2.339) величины C_{ijkn} суммируются после умножения на тензор $u_{ij}u_{kn}$, симметричный к перестановке индексов внутри пар ij , kn и к перестановке самих пар индексов, тензор C_{ijkn} обладает симметрией к таким же самым перестановкам индексов (если бы тензор C_{ijkn} имел антисимметричную часть, эта часть все равно не дала бы вклада в сумму (2.339)). Методом прямой проверки легко убедиться, что в каждом из

кристаллических классов кубической сингонии ненулевые компоненты тензора C_{ijkl} с указанной индексной симметрией выражаются через три независимых модуля упругости:

$$\begin{aligned} C_{xxxx} &= C_{yyyy} = C_{zzzz} \equiv C_{11}, \\ C_{xxyy} &= C_{yyzz} = C_{zzxx} = C_{yyxx} = C_{zzyy} = C_{xxzz} \equiv C_{12}, \\ C_{xyxy} &= C_{yzyz} = C_{zxzx} = C_{yxyx} = C_{zyzy} = C_{xzxz} = \\ &= C_{xyyx} = C_{yzzy} = C_{zxxz} = C_{yxxy} = C_{zyyz} = C_{xzzx} \equiv C_{44}. \end{aligned} \quad (2.340)$$

Производные $\partial U_{\partial e\phi} / \partial u_{ij}$ квадратичной формы (2.339) составляют тензор напряжений $s_{ij} = s_{ji}$ (при вычислении этих производных величины u_{ij} и u_{ji} считаются независимыми переменными):

$$s_{ij} = \sum_k \sum_n C_{ijkn} u_{kn}. \quad (2.341)$$

В сверхрешетке, образованной периодически чередующимися слоями А и В, усредненная по периоду плотность упругой энергии есть

$$U_{\partial e\phi} = \frac{U_{\partial e\phi}^A d_A + U_{\partial e\phi}^B d_B}{d_A + d_B}, \quad (2.342)$$

где d_i – толщина слоя ($i = A, B$), $U_{\partial e\phi}^i$ – выражение (2.339), содержащее упругие постоянные слоя i . Требование минимальности энергии (2.342) совместно с условиями (2.338) позволяет найти тензоры деформации u_{ij}^A и u_{ij}^B ; выражения для них в общем случае громоздки [21].

а) Деформация (001)-слоя. Применим этот метод к вычислению деформации слоя А, выращенного в направлении (001) в условиях отсутствия деформации материала В, окружающего слой А. В данном примере

$$\mathbf{N}_1 = \mathbf{e}_x, \quad \mathbf{N}_2 = \mathbf{e}_y, \quad \mathbf{N}_3 = \mathbf{e}_z. \quad (2.343))$$

Разложение базисных векторов решетки Браве, показанных на рис. 2.18, a , по ортам \mathbf{e}_x , \mathbf{e}_y , \mathbf{e}_z имеет вид:

$$\mathbf{a}_1 = \frac{a}{2}(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y), \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}(\mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z), \quad \mathbf{a}_3 = \frac{a}{2}(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_z), \quad (2.344)$$

где надо полагать $a = a_A$ для материала А и, соответственно, $a = a_B$ для материала В. Поскольку материал В не деформирован, штрих в правой стороне формул (2.338) теперь не нужен:

$$\mathbf{a}'_l|_A \cdot \mathbf{N}_1 = \mathbf{a}_l|_B \cdot \mathbf{N}_1, \quad \mathbf{a}'_l|_A \cdot \mathbf{N}_2 = \mathbf{a}_l|_B \cdot \mathbf{N}_2, \quad l = 1, 2, 3. \quad (2.345)$$

Заметим, что

$$(\hat{u}\mathbf{a}) \cdot \mathbf{N}_k = \left(\sum_i \sum_j u_{ij} a_j \mathbf{e}_i \right) \cdot \mathbf{e}_k = \sum_j u_{kj} a_j = \sum_j u_{kj} \mathbf{e}_j \cdot \mathbf{a}. \quad (2.346)$$

Первая из двух формул (2.345) при $l = 1$ в подробной записи с учетом (2.343), (2.336), (2.346) и (2.344) принимает вид:

$$\begin{aligned} \frac{a_A}{2}(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y) \cdot \mathbf{e}_x + \frac{a_A}{2} \left(u_{xx} \mathbf{e}_x \cdot (\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y) + u_{xy} \mathbf{e}_y \cdot (\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y) + u_{xz} \mathbf{e}_z \cdot (\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y) \right) = \\ = \frac{a_B}{2}(\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y) \cdot \mathbf{e}_x, \end{aligned}$$

так что:

$$u_{xx} + u_{xy} = \frac{a_B - a_A}{a_A}. \quad (2.347, a)$$

Остальные формулы (2.345) аналогичным образом приводят к уравнениям:

$$u_{yx} + u_{yy} = \frac{a_B - a_A}{a_A}, \quad u_{yy} + u_{yz} = \frac{a_B - a_A}{a_A}, \quad u_{xx} + u_{xz} = \frac{a_B - a_A}{a_A}, \quad (2.347, б)$$

$$u_{xy} + u_{xz} = 0, \quad u_{yx} + u_{yz} = 0. \quad (2.347, в)$$

Уравнения (2.347) определяют все компоненты симметричного тензора деформации, кроме u_{zz} :

$$u_{xy} = u_{xz} = u_{yz} = 0, \quad u_{xx} = u_{yy} = \frac{a_B - a_A}{a_A}. \quad (2.348)$$

Чтобы найти u_{zz} , воспользуемся условием минимальности упругой энергии $\partial U_{def} / \partial u_{zz} = 0$. В данном примере оно эквивалентно условию отсутствия механического напряжения в направлении роста слоя А:

$$s_{zz} = C_{zzxx}u_{xx} + C_{zzyy}u_{yy} + C_{zzzz}u_{zz} = 0. \quad (2.349)$$

С учетом равенств (2.348) и обозначений модулей упругости (2.340), получим:

$$u_{zz} = -\frac{2C_{12}}{C_{11}} \frac{(a_B - a_A)}{a_A}. \quad (2.350)$$

Результат (2.348)–(2.350), конечно, проще вывести из наглядных представлений, так как направление роста слоя А в данном примере является осью симметрии высокого порядка (четвертого). В самом деле, естественно ожидать, что в силу указанной симметрии орты главных осей тензора деформации \mathbf{n}_1 , \mathbf{n}_2 , \mathbf{n}_3 совпадают с ортами \mathbf{e}_x , \mathbf{e}_y , \mathbf{e}_z , а деформация в любом направлении, параллельном плоскости слоя, имеет одну и ту же величину, равную относительной разности объемных постоянных решетки материалов слоя А и подложки В. Это сразу ведет к (2.348). Условие отсутствия поперечного к слою напряжения (2.349) приводит к (2.350).

б) Деформация (111)-слоя. Найдем аналогичным образом тензор деформации в слое А с направлением роста (111). Это направление также является осью симметрии высокого порядка (третьего), поэтому можно предвидеть, что тензор деформации и тензор напряжений приводятся к диагональному виду в осях \mathbf{N}_1 , \mathbf{N}_2 , \mathbf{N}_3 , связанных с ориентацией (111)-слоя. Пользуясь при этом свободой в нумерации осей, положим:

$$\mathbf{n}_1 = \mathbf{N}_3 = (\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z) / \sqrt{3}, \quad (2.351, a)$$

$$\mathbf{n}_2 = \mathbf{N}_1 = (\mathbf{e}_y - \mathbf{e}_z) / \sqrt{2}, \quad \mathbf{n}_3 = \mathbf{N}_2 = (-2\mathbf{e}_x + \mathbf{e}_y + \mathbf{e}_z) / \sqrt{6}. \quad (2.351, б)$$

Мы ожидаем, что матрицы тензоров деформации \hat{u} и напряжений \hat{s} в системе координат с оортами \mathbf{n}_1 , \mathbf{n}_2 , \mathbf{n}_3 должны иметь вид:

$$\hat{u} = \begin{pmatrix} u_l & 0 & 0 \\ 0 & u_t & 0 \\ 0 & 0 & u_t \end{pmatrix}, \quad \hat{s} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & s_t & 0 \\ 0 & 0 & s_t \end{pmatrix}. \quad (2.352)$$

Знаком l отмечены компоненты, продольные по отношению к оси роста слоя А, знаком t – поперечные. В (2.352) учтено, что напряжение вдоль оси роста равно нулю:

$$s_l = 0. \quad (2.353)$$

Поперечные к оси роста компоненты деформации ($u_{22} = u_{33} \equiv u_t$) должны определяться разностью постоянных решетки материалов слоя А и подложки В:

$$u_t = \frac{a_B - a_A}{a_A}. \quad (2.354)$$

Продольная к оси роста деформация u_l зависит от u_t и от модулей упругости C_{ijkn} , но последние известны в кристаллографической системе координат (с оортами \mathbf{e}_x , \mathbf{e}_y , \mathbf{e}_z) и, значит, к этой же системе координат следует преобразовать тензоры второго ранга (2.352). В данном примере такое преобразование производится в полной аналогии с (2.308), (2.315)–(2.317). Поскольку u_l и u_t аналогичны величинам $1/m_l$ и $1/m_t$ в (2.316)–(2.317), немедленно получаем:

$$u_{xx} = u_{yy} = u_{zz} = (u_l + 2u_t)/3, \quad (2.355, a)$$

$$u_{xy} = u_{xz} = u_{yz} = (u_l - u_t)/3. \quad (2.355, б)$$

Тензор напряжений принимает подобный же вид с $s_l = 0$:

$$s_{xx} = s_{yy} = s_{zz} = 2s_t/3, \quad (2.356, a)$$

$$s_{xy} = s_{xz} = s_{yz} = -s_t/3. \quad (2.356, б)$$

Как видно из (2.356), следствием условия $s_l = 0$ является равенство

$$s_{xx} = -2s_{xy}. \quad (2.357)$$

Подставляя в (2.357) выражения (2.341),

$$\begin{aligned} s_{xx} &= C_{11}u_{xx} + C_{12}(u_{yy} + u_{zz}), \\ s_{xy} &= 2C_{44}u_{xy}, \end{aligned}$$

и пользуясь формулами (2.355), имеем уравнение, позволяющее найти u_l ; результат имеет вид:

$$u_l = -2 \frac{C_{11} + 2C_{12} - 2C_{44}}{C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}} u_t = -2 \frac{C_{11} + 2C_{12} - 2C_{44}}{C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}} \left(\frac{a_B - a_A}{a_A} \right). \quad (2.358)$$

Подставив этот результат в (2.355), приходим к окончательным выражениям для компонент тензора деформации (111)-слоя А в системе координатных осей x, y, z , параллельных направлениям кубической решетки (100), (010), (001):

$$u_{xx} = u_{yy} = u_{zz} = \frac{4C_{44}}{C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}} \left(\frac{a_B - a_A}{a_A} \right), \quad (2.359, a)$$

$$u_{xy} = u_{xz} = u_{yz} = \frac{-C_{12} - 2C_{12}}{C_{11} + 2C_{12} + 4C_{44}} \left(\frac{a_B - a_A}{a_A} \right). \quad (2.359, б)$$

в) *Разложение деформации на всестороннее сжатие и сдвиг.* Напомним, каким образом тензор деформации раскладывается на составляющие, которые описывают всесторонне сжатие (или растяжение) и сдвиг [19].

При всестороннем сжатии относительные изменения u^{bc} линейных размеров элемента среды одинаковы во всех направлениях, поэтому тензор деформации имеет диагональный вид, один и тот же в разных системах координат:

$$\hat{u}^{bc} = \begin{pmatrix} u^{bc} & 0 & 0 \\ 0 & u^{bc} & 0 \\ 0 & 0 & u^{bc} \end{pmatrix}, \quad \text{то есть } u_{ij}^{bc} = u^{bc} \delta_{ij}. \quad (2.360)$$

Сдвигом называют деформацию, при которой не изменяется объем деформируемого элемента среды. Возьмем элемент среды в форме прямоугольного параллелепипеда со сторонами a_1 , a_2 , a_3 , направленными вдоль главных осей тензора произвольной деформации u_{ij} . Тогда стороны деформированного параллелепипеда составят

$$a'_1 = a_1(1 + u_1), \quad a'_2 = a_2(1 + u_2), \quad a'_3 = a_3(1 + u_3), \quad (2.361)$$

где $u_\alpha = u_{\alpha\alpha}$ – главные значения тензора деформации. Объем деформированного элемента среды будет равен

$$V' = a'_1 a'_2 a'_3 = a_1 a_2 a_3 (1 + u_{11})(1 + u_{22})(1 + u_{33}) = V(1 + u_{11} + u_{22} + u_{33}).$$

Правая сторона этого равенства написана в линейном приближении по малым величинам $|u_{\alpha\alpha}| \ll 1$. Видно, что относительное изменение объема при произвольной малой деформации определяется суммой диагональных элементов тензора деформации (эта сумма называется следом тензора \hat{u} и обозначается как $\text{Sp}(\hat{u})$):

$$\frac{V' - V}{V} = u_{11} + u_{22} + u_{33} \equiv \text{Sp}(\hat{u}). \quad (2.362)$$

След тензора инвариантен к поворотам и отражениям координатных осей, поэтому формулой (2.362) можно пользоваться в любой ортогональной системе координат. Таким образом, если $\text{Sp}(\hat{u}) = 0$, то деформация представляет собой сдвиг.

Напишем следующее тождество:

$$u_{ij} = \left(u_{ij} - \frac{1}{3} \text{Sp}(\hat{u}) \delta_{ij} \right) + \frac{1}{3} \text{Sp}(\hat{u}) \delta_{ij}. \quad (2.363)$$

Здесь первый член имеет след, равный нулю (так как след тензора δ_{ij} равен трем), и поэтому описывает сдвиг. Вторым членом имеет вид (2.360) и, следовательно, описывает всестороннее сжатие. Таким образом, любую малую деформацию можно представить в виде суммы деформаций сдвига и всестороннего сжатия:

$$u_{ij}^{cd\delta} = \left(u_{ij} - \frac{1}{3} \text{Sp}(\hat{u}) \delta_{ij} \right), \quad u_{ij}^{e\epsilon} = \frac{1}{3} \text{Sp}(\hat{u}) \delta_{ij} = \frac{1}{3} \frac{\delta V}{V} \delta_{ij}. \quad (2.364)$$

Для примера рассмотрим деформацию (001)-слоя (2.348), (3.350). В этом примере ненулевые компоненты тензоров (2.364) можно записать в виде:

$$u_{xx}^{cd\delta} = u_{yy}^{cd\delta} = (1/3)(u_{xx} - u_{zz}), \quad u_{zz}^{cd\delta} = (-2/3)(u_{xx} - u_{zz}), \quad (2.365)$$

$$u_{xx}^{e\epsilon} = u_{yy}^{e\epsilon} = u_{zz}^{e\epsilon} = (1/3)(u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}) = (1/3)(2u_{xx} + u_{zz}). \quad (2.366)$$

В случае деформации (111)-слоя (2.359) у тензора сдвига появляются отличные от нуля недиагональные компоненты (2.359, б). Диагональные компоненты тензоров (2.364) при этом имеют вид:

$$u_{xx}^{cd\delta} = u_{yy}^{cd\delta} = u_{zz}^{cd\delta} = 0, \quad u_{xx}^{e\epsilon} = u_{yy}^{e\epsilon} = u_{zz}^{e\epsilon} = (u_{xx} + u_{yy} + u_{zz})/3 = u_{xx}. \quad (2.367)$$

2.7.2. Гамильтониан Бира–Пикуса

Влияние малой деформации \hat{u} на спектр энергии можно рассматривать как возмущение \hat{H}_u , которое изменяет $k\mathbf{p}$ -гамильтониан $\hat{H}(\mathbf{k})$ электрона в кристалле – в присутствии деформации матрица $k\mathbf{p}$ -гамильтониана $\hat{H}(\mathbf{k}, \hat{u})$ представляется суммой матриц:

$$\hat{H}(\mathbf{k}, \hat{u}) = \hat{H}(\mathbf{k}) + \hat{H}_u. \quad (2.368)$$

Вид матрицы \hat{H}_u определяется формой невозмущенного гамильтониана $\hat{H}(\mathbf{k})$, то есть \hat{H}_u зависит от выбора модели. Аргументированный выбор

\hat{H}_u – сложная задача, подробно исследованная Биром и Пикусом [3]. В честь авторов этого исследования матрицу \hat{H}_u называют гамильтонианом Бира–Пикуса; необходимо отметить, что в книге Бира и Пикуса [3] рассмотрены также приложения теории деформации и теории симметрии к многочисленным задачам физики полупроводников.

Если оставить без внимания аргументацию и оценки различных вкладов, то построение наиболее существенного вклада в \hat{H}_u можно описать так: к членам исходного гамильтониана $\hat{H}(\mathbf{k})$, содержащим тензор второго ранга $k_i k_j$, добавляются аналогичные по структуре возмущающие члены, пропорциональные тензору второго ранга u_{ij} . Сходство структур $\hat{H}(\mathbf{k})$ и \hat{H}_u здесь продиктовано требованием инвариантности к преобразованиям симметрии всех параметров кристалла, входящих в гамильтониан (2.368).

Рассмотрим прежде всего элементарный пример – однозонную модель невырожденного энергетического спектра электрона с изотропной эффективной массой. В этом случае невозмущенный $k\mathbf{p}$ -гамильтониан имеет вид (2.24):

$$E(\mathbf{k}) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x k_x + k_y k_y + k_z k_z). \quad (2.369)$$

Следовательно, возмущенный спектр энергии можно описывать выражением

$$E(\mathbf{k}, \hat{u}) = E_c + \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + a_c (u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}), \quad (2.370)$$

где a_c – скалярный параметр с размерностью энергии, называемый деформационным потенциалом зоны проводимости. Видно, что в этом примере влияние деформации сводится к смещению края зоны проводимости E_c на величину $a_c (u_{xx} + u_{yy} + u_{zz})$. Если деформация представляет собой сдвиг, то смещение края зоны отсутствует (так как при сдвиге $u_{xx} + u_{yy} + u_{zz} = 0$). В однозонной задаче о размерном квантовании состояний зоны проводимости смещение края зоны проводимости ведет

просто к одному и тому же смещению всех уровней энергии. На практике важны изменения разности энергий, например – между уровнями, участвующими в оптических переходах.

Следующий пример – анизотропная зона проводимости с энергетическим спектром (2.21):

$$E(\mathbf{k}) = E_c + \frac{\hbar^2}{2} \sum_i \sum_j (m^{-1})_{ij} k_i k_j, \quad i, j = x, y, z. \quad (2.371)$$

Наиболее существенный вклад в зависящую от деформации часть энергии в этом примере также имеет вид смещения края зоны проводимости:

$$\delta E_c(\hat{u}) = \sum_i \sum_j D_{ij} u_{ij}, \quad (2.372)$$

где $D_{ij} = D_{ji}$ – тензор констант деформационного потенциала.

В практически важном случае многодолинной зоны проводимости (см. рис. 2.19) речь должна идти о тензорах D_{ij} и $(m^{-1})_{ij}$ для каждой долины отдельно. Эти два тензора, являясь параметрами одного и того же кристалла, имеют одинаковую симметрию. Если долина имеет форму эллипсоида вращения, то тензор D_{ij} характеризуется двумя параметрами – своими главными значениями $D_{11} \equiv D_l$ и $D_{22} = D_{33} \equiv D_t$ (нередко пользуются обозначениями $D_u = D_l - D_t$, $D_d = D_t$). В частности, для пар долин в n-Si, лежащих на осях k_x , k_y , k_z (рис. 2.19, б), смещения энергии (2.372) запишутся в виде:

$$\begin{aligned} \delta E_{c,x} &= D_l u_{xx} + D_t (u_{yy} + u_{zz}), \\ \delta E_{c,y} &= D_l u_{yy} + D_t (u_{xx} + u_{zz}), \\ \delta E_{c,z} &= D_l u_{zz} + D_t (u_{xx} + u_{yy}). \end{aligned} \quad (2.373)$$

Отсюда видно, что при деформации (2.348), (2.350) с $u_{xx} = u_{yy} \neq u_{zz}$, сопутствующей росту кристаллического слоя в направлении (001), смещения краев зон составляют:

$$\begin{aligned}\delta E_{c,x} = \delta E_{c,y} &= (D_l + D_t)u_{xx} + D_t u_{zz} \quad , \\ \delta E_{c,z} &= D_l u_{zz} + 2D_t u_{xx} .\end{aligned}\quad (2.374)$$

Таким образом, в слое Si(001) возможно деформационное расщепление шести эквивалентных экстремумов зоны проводимости на два и четыре.

Рассмотрим подобным же образом долины зоны проводимости Ge (рис. 2.19, *a*). Переход от системы главных осей тензора D_{ij} в «первой» долине, лежащей на оси $k_x = k_y = k_z$, к системе координат x, y, z приводит к результату, полностью аналогичному (2.355):

$$\begin{aligned}D_{xx} = D_{yy} = D_{zz} &= (D_l + 2D_t)/3, \\ D_{xy} = D_{xz} = D_{yz} &= (D_l - D_t)/3 \quad ; \quad \text{для долины «1»}.\end{aligned}\quad (2.375)$$

Для «второй» долины, лежащей на оси $k_x = -k_y = k_z$, тензор D_{ij} легко вычислить, применив к (2.375) преобразование, отвечающее повороту координатных осей на угол $\pi/2$ вокруг оси z (в повернутых осях долина «1» имеет такое же положение, какое имеет долина «2» в исходных осях). Пользуясь тем, что D_{ij} преобразуется как $x_i x_j$, причем в результате указанного поворота $x' = y, y' = -x, z' = z$, найдем, что диагональные компоненты D_{ii} сохраняют прежний вид, а недиагональные определяются соотношениями

$$-D_{xy} = D_{xz} = -D_{yz} = (D_l - D_t)/3 \quad ; \quad \text{для долины «2»}.\quad (2.376)$$

Для «третьей» долины (на оси $-k_x = -k_y = k_z$) и для «четвертой» долины (на оси $-k_x = k_y = k_z$) тензор D_{ij} вычисляется посредством аналогичных поворотов координат вокруг оси z на углы $2\pi/2$ и $3\pi/2$ соответственно; результат:

$$D_{xy} = -D_{xz} = -D_{yz} = (D_l - D_t)/3 \quad ; \quad \text{для долины «3»},\quad (2.377)$$

$$-D_{xy} = -D_{xz} = D_{yz} = (D_l - D_t)/3 \quad ; \quad \text{для долины «4»}.\quad (2.378)$$

Диагональные компоненты D_{jj} во всех четырех долинах равны величине $(D_l + 2D_t)/3$.

Видно, что в слое Ge(001) с деформацией (2.348), (2.350), не содержащей недиагональных компонент, расщепления долин зоны проводимости нет – энергия всех четырех долин смещается на одну и ту же величину

$$(1/3)(D_l + 2D_t)(u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}) = (D_l + 2D_t)u^{6c}. \quad (2.379)$$

В слое Ge(111) с деформацией (2.359) возможно деформационное расщепление четырех эквивалентных экстремумов зоны проводимости на один и три:

$$\begin{aligned} \delta E_{c,1} &= (D_l + 2D_t)u_{xx} + 2(D_l - D_t)u_{xy}, \\ \delta E_{c,2} = \delta E_{c,3} = \delta E_{c,4} &= (D_l + 2D_t)u_{xx} - (2/3)(D_l - D_t)u_{xy}. \end{aligned} \quad (2.380)$$

Конечно, в простых случаях симметрия системы позволяет предвидеть характер расщепления долин из наглядных представлений, без вычислений. Но для количественного анализа деформационных эффектов вычисления с применением аппарата тензоров становятся необходимыми. Мы не приводим здесь справочных данных о параметрах материалов и ограничимся следующей оценкой. Масштабом для типичных значений констант деформационного потенциала является энергия кулоновского взаимодействия электронов с ионами кристаллической решетки e^2/a , обычно составляющая несколько эВ. Следовательно, в напряженных структурах с рассогласованием постоянных решетки порядка 1% деформационные смещения электронных уровней энергии могут составлять десятки мэВ – существенный эффект в практических задачах о размерном квантовании энергетического спектра.

Учет деформационного смещения энергии важен также в кристаллах с вырожденными валентными зонами, так как в этом случае деформация приводит к качественному эффекту – снятию вырождения энергетических уровней. Для примера рассмотрим гамильтониан обобщенной модели Кейна (2.84), пренебрегая на этот раз линейными по волновому вектору членами, смешивающими волновые функции зоны проводимости и

валентных зон lh, hh, so. В таком приближении зона проводимости параболична, электроны в ней характеризуются эффективной массой m_c , а влияние деформации на положение края зоны проводимости описывается с помощью одного параметра – деформационного потенциала a_c (как в модели (2.369)–(2.370)):

$$E_c(k=0, \hat{u}) = E_c + a_c(u_{xx} + u_{yy} + u_{zz}). \quad (2.381)$$

Поскольку в таком подходе валентные зоны Γ_8 и Γ_7 не взаимодействуют с зоной проводимости (Γ_6), можно часть матрицы (2.84), относящуюся к базисным состояниям Γ_8 и Γ_7 , рассматривать в качестве самостоятельного k -гамильтониана $\hat{H}_{\Gamma_8, \Gamma_7}$ размером 6×6 . Матричные элементы этого гамильтониана определяются функциями F, G, H, I с квадратичной зависимостью от волнового вектора (2.87).

Построим гамильтониан Бира–Пикуса \hat{H}_u со структурой матрицы $\hat{H}_{\Gamma_8, \Gamma_7}$. С этой целью в функциях F, G, H, I (2.87) заменим $k_i k_j$ компонентами тензора деформации u_{ij} , а вместо зонных параметров A, B, D введем в рассмотрение соответствующие константы деформационного потенциала валентной зоны a_v, b_v, d_v . Полученные таким образом новые функции обозначим как f, g, h, j :

$$\left. \begin{aligned} f &= (a_v + \frac{b_v}{2})(u_{xx} + u_{yy}) + (a_v - b_v)u_{zz}, \\ g &= (a_v - \frac{b_v}{2})(u_{xx} + u_{yy}) + (a_v + b_v)u_{zz}, \\ h &= -d_v(u_{xz} - iu_{yz}), \\ j &= -\frac{\sqrt{3}}{2}b_v(u_{xx} - u_{yy}) + id_v u_{xy}, \end{aligned} \right\} \quad (2.382)$$

Гамильтониан Бира–Пикуса \hat{H}_u в этом примере имеет вид (в базисе (2.66)):

	$ u_{30}\rangle$	$ u_{40}\rangle$	$ u_{50}\rangle$	$ u_{60}\rangle$	$ u_{70}\rangle$	$ u_{80}\rangle$
$\langle u_{30} $	f	h	j	0	$\frac{h}{\sqrt{2}}$	$\sqrt{2}j$
$\langle u_{40} $	h^*	g	0	j	$\frac{g-f}{\sqrt{2}}$	$-\sqrt{\frac{3}{2}}h$
$\langle u_{50} $	j^*	0	g	$-h$	$-\sqrt{\frac{3}{2}}h^*$	$\frac{f-g}{\sqrt{2}}$
$\langle u_{60} $	0	j^*	$-h^*$	f	$-\sqrt{2}j^*$	$\frac{h^*}{\sqrt{2}}$
$\langle u_{70} $	$\frac{h^*}{\sqrt{2}}$	$\frac{g-f}{\sqrt{2}}$	$-\sqrt{\frac{3}{2}}h$	$-\sqrt{2}j$	$\frac{f+g}{2}$	0
$\langle u_{80} $	$\sqrt{2}j^*$	$-\sqrt{\frac{3}{2}}h^*$	$\frac{f-g}{\sqrt{2}}$	$\frac{h}{\sqrt{2}}$	0	$\frac{f+g}{2}$

(2.383)

Найдем влияние деформации (2.348), (3.350) на уровни энергии валентной зоны (001)-слоя полупроводника, пользуясь моделью (2.383). Для такой деформации характерны соотношения $u_{xx} = u_{yy} \neq u_{zz}$ и равенство нулю недиагональных компонент тензора деформации. Функции f, g, h, j (2.382) принимают вид:

$$\begin{aligned}
 f &= a_v(2u_{xx} + u_{zz}) + b_v(u_{xx} - u_{zz}), \\
 g &= a_v(2u_{xx} + u_{zz}) - b_v(u_{xx} - u_{zz}), \\
 h &= 0, \quad j = 0.
 \end{aligned}
 \tag{2.384}$$

Сравнив эти выражения с (2.365)–(2.366), замечаем, что константа деформационного потенциала a_v здесь определяет вклад всестороннего сжатия, тогда как b_v определяет вклад сдвига. Введем для указанных вкладов краткие обозначения:

$$f^{ec} = a_v(2u_{xx} + u_{zz}), \quad f^{cdg} = b_v(u_{xx} - u_{zz}).
 \tag{2.385}$$

Чтобы вычислить положения краев валентной зоны достаточно найти собственные значения гамильтониана при $\mathbf{k} = 0$. Выпишем возмущенный гамильтониан $\hat{H}_{\Gamma_8, \Gamma_7}(\mathbf{k} = 0) + \hat{H}_u$:

	$ u_{30}\rangle$	$ u_{40}\rangle$	$ u_{50}\rangle$	$ u_{60}\rangle$	$ u_{70}\rangle$	$ u_{80}\rangle$
$\langle u_{30} $	$E_v + f^{vc} + f^{cdv}$	0	0	0	0	0
$\langle u_{40} $	0	$E_v + f^{vc} - f^{cdv}$	0	0	$-\sqrt{2}f^{cdv}$	0
$\langle u_{50} $	0	0	$E_v + f^{vc} - f^{cdv}$	0	0	$\sqrt{2}f^{cdv}$
$\langle u_{60} $	0	0	0	$E_v + f^{vc} + f^{cdv}$	0	0
$\langle u_{70} $	0	$-\sqrt{2}f^{cdv}$	0	0	$E_v - \Delta + f^{vc}$	0
$\langle u_{80} $	0	0	$\sqrt{2}f^{cdv}$	0	0	$E_v - \Delta + f^{vc}$

(2.386)

Видно, что тяжелые дырки (состояния $|u_{30}\rangle$ и $|u_{60}\rangle$ со спином $J_z = \pm 3/2$) не взаимодействуют с остальными состояниями. Диагональные матричные элементы гамильтониана (2.386), отвечающие состояниям $|u_{30}\rangle$ и $|u_{60}\rangle$, дают двукратно вырожденный по спину уровень края зоны тяжелых дырок:

$$E_{hh}(\hat{u}) = E_v + f^{vc} + f^{cdv}. \quad (2.387)$$

Остальная часть матрицы (2.386) распадается на две независимые матрицы формата 2×2 – с базисом $|u_{40}\rangle, |u_{70}\rangle$ и $|u_{50}\rangle, |u_{80}\rangle$. Секулярные уравнения этих матриц одинаковы (что указывает на двукратное крамерсово вырождение уровней энергии), поэтому выпишем только первую из них:

	$ u_{40}\rangle$	$ u_{70}\rangle$
$\langle u_{40} $	$E_v + f^{sc} - f^{cd\delta}$	$-\sqrt{2}f^{cd\delta}$
$\langle u_{70} $	$-\sqrt{2}f^{cd\delta}$	$E_v - \Delta + f^{sc}$

(2.388)

Собственные значения матрицы (2.388), то есть два корня E уравнения

$$(E_v + f^{sc} - f^{cd\delta} - E)(E_v - \Delta + f^{sc} - E) - 2(f^{cd\delta})^2 = 0,$$

определяют край зоны легких дырок (lh) и край спин-орбитально отщепленной зоны дырок (so):

$$E_{lh}(\hat{u}) = E_v + f^{sc} - \frac{f^{cd\delta}}{2} - \frac{\Delta}{2} + \sqrt{\frac{\Delta^2}{4} - \frac{f^{cd\delta}\Delta}{2} + \frac{9}{4}(f^{cd\delta})^2}, \quad (2.389)$$

$$E_{so}(\hat{u}) = E_v + f^{sc} - \frac{f^{cd\delta}}{2} - \frac{\Delta}{2} - \sqrt{\frac{\Delta^2}{4} - \frac{f^{cd\delta}\Delta}{2} + \frac{9}{4}(f^{cd\delta})^2}. \quad (2.390)$$

Энергия расщепления зон легких и тяжелых дырок равна разности величин (2.389) и (2.387).

В общем случае, при произвольном $\hat{u} \neq 0$ и $\mathbf{k} \neq 0$, $k\rho$ -гамильтониан $\hat{H}(\mathbf{k}, \hat{u}) = \hat{H}(\mathbf{k}) + \hat{H}_u$ позволяет исследовать дополнительную анизотропию объемного энергетического спектра валентной зоны, вызываемую деформацией [3]. В методе огибающих функций гамильтониан $\hat{H}(-i\nabla, \hat{u})$ применяется для расчетов влияния деформации на размерно-квантованные уровни энергии напряженных наноструктур.

2.7.3. Пьезоэлектрический эффект

Выше речь шла о воздействии деформации на параметры зонного спектра электронов, которое учитывается с помощью констант деформационного потенциала. Наряду с этим воздействием деформация может приводить к изменению потенциального рельефа $U(\mathbf{r})$

гетероструктуры. Такое изменение $U(\mathbf{r})$ вызывают пьезоэлектрические поля [21]; естественно, они могут возникать только в тех кристаллах, где пьезоэлектрический эффект допускается симметрией кристаллической решетки. В этом разделе мы вспомним основные сведения о пьезоэлектрическом эффекте и рассмотрим простой пример.

Пьезоэлектрический эффект можно описать как возникновение в среде поляризации \mathbf{P} , пропорциональной тензору деформации \hat{u} . Вектор \mathbf{P} есть электрический дипольный момент в расчете на единицу объема среды. Коэффициенты пропорциональности между компонентами вектора P_i и тензора второго ранга $u_{jk} = u_{kj}$ образуют тензор третьего ранга $d_{ijk} = d_{ikj}$:

$$P_i = \sum_j \sum_k d_{ijk} u_{jk} . \quad (2.391)$$

Пьезоэлектрические постоянные кристалла d_{ijk} наравне с другими его параметрами должны быть инвариантами по отношению к преобразованиям симметрии кристалла. В то же время тензор d_{ijk} , подобно всякому тензору третьего ранга, преобразуется как трехкратное произведение координат $x_i x_j x_k$. В частности, при инверсии координат (при замене x, y, z на $-x, -y, -z$) величины d_{ijk} переходят в $-d_{ijk}$. Следовательно, если инверсия является преобразованием симметрии, то $d_{ijk} = 0$. Другими словами, в кристаллах с центром инверсии пьезоэлектрического эффекта не существует.

В кубической сингонии есть три кристаллических класса, не содержащих инверсию – O , T и T_d . Симметрия O не допускает пьезоэлектрического эффекта, так как требует, чтобы отличный от нуля тензор третьего ранга d_{ijk} был антисимметричным к перестановке любых двух индексов. Для нас представляет интерес симметрия T_d , поскольку этой симметрией обладают соединения III–V со структурой цинковой обманки, широко используемые на практике. Как обычно, выберем в качестве координатных осей x, y, z направления (100), (010), (001). Пользуясь методом прямой проверки, легко убедиться, что в этой системе координат у тензора третьего ранга d_{ijk} , инвариантного к группе

преобразований T_d , могут быть не равными нулю лишь следующие компоненты (аналогично (2.92)):

$$\begin{aligned} d_{xyz} = d_{yzx} = d_{zxy} = \\ = d_{yxz} = d_{xzy} = d_{zyx} \neq 0, \quad \text{остальные } d_{ijk} = 0. \end{aligned} \quad (2.392)$$

Подставляя (2.392) в (2.391) и учитывая симметрию наших тензоров к перестановке индексов, по которым ведется суммирование, получим:

$$P_x = 2d_{xyz}u_{yz}, \quad P_y = 2d_{yzx}u_{zx}, \quad P_z = 2d_{zxy}u_{xy}. \quad (2.393)$$

Рассмотрим (001)-слой с деформацией (2.248), (2.250). Поскольку в этом случае недиагональные компоненты тензора деформации u_{jk} равны нулю, обращаются в ноль и все три компоненты (2.393) вектора поляризации: $\mathbf{P} = 0$. Таким образом, в напряженной гетероструктуре с направлением роста (001) пьезоэффект отсутствует (несмотря на то, что материал с симметрией T_d является пьезоэлектриком).

Однако в гетероструктурах с направлением роста (111) картина будет иной. В этом случае тензор деформации описывается формулами (2.359) – все его недиагональные компоненты отличны от нуля, причем они равны друг другу. Следовательно, отличны от нуля и равны друг другу компоненты (2.393) вектора поляризации \mathbf{P} – этот вектор оказывается параллельным оси гетероструктуры (111). Если вне напряженного слоя А деформация равна нулю, то и вектор поляризации там обращается в ноль. Согласно законам электростатики, при этом вблизи интерфейсов слоя А образуется поляризационный заряд с плотностью $\rho = -\nabla \cdot \mathbf{P}$. Образно говоря, интерфейсы слоя А становятся подобными обкладкам заряженного конденсатора и создают в слое А электрическое поле \mathbf{E} , перпендикулярное плоскости интерфейсов. В напряженной сверхрешетке деформируются как слои А, так и слои В. Поскольку деформация в соседних слоях противоположна по знаку, векторы электрического поля \mathbf{E} в соседних слоях направлены навстречу друг другу. При этом потенциал сверхрешетки $U(\mathbf{r})$, ответственный за формирование минизон, в направлении оси сверхрешетки (111) приобретает «пилообразную» форму. На рис. 2.22 воспроизведены некоторые результаты расчетов из обзора

[21], позволяющие составить представление о величине рассмотренных эффектов.

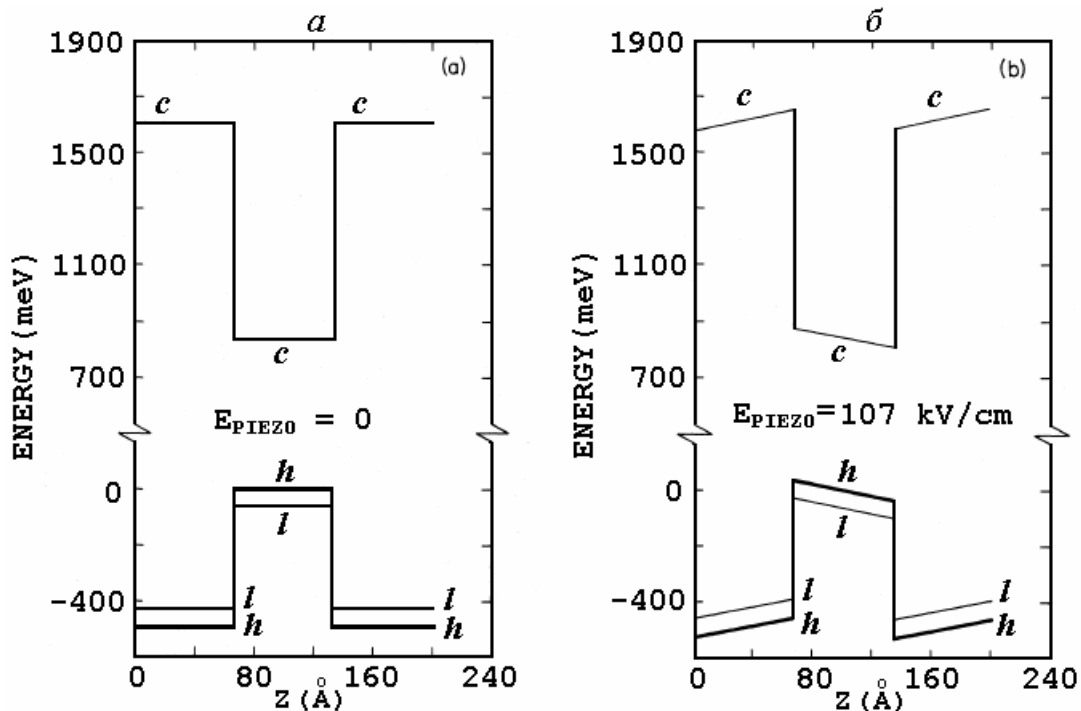


Рис. 2.22. Энергетическая диаграмма напряженных слоев сверхрешетки с ориентацией роста (111); данные из обзора [21].

a – диаграмма без учета внутренних пьезоэлектрических полей, *б* – с учетом внутренних пьезоэлектрических полей. В квантовых ямах напряженность пьезоэлектрического поля $|E| = 107$ кВ/см. Значки *c*, *h*, *l* отмечают края зоны проводимости, зоны тяжелых дырок и зоны легких дырок, соответственно. Начало отсчета энергии выбрано в максимуме валентной зоны, в середине напряженного слоя с квантовой ямой. Сверхрешетка содержит 20 слоев $Ga_{0,47}In_{0,53}As$ (квантовые ямы), чередующихся с 20 слоями $Al_{0,7}In_{0,3}As$ (барьеры).

Здесь виден также эффект деформационного расщепления зоны легких и тяжелых дырок (подробно рассмотренный в предыдущем разделе для направления оси роста гетероструктуры (001)). Отметим, что в соседних слоях, вследствие разного знака деформации, положения краев зоны легких дырок и зоны тяжелых дырок меняются местами.

БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЙ СПИСОК

1. *Ландау Л.Д.* Квантовая механика / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М.: Физматлит, 2004. – 800 с.
2. *Ю П.* Основы физики полупроводников / П. Ю, М. Кардона. – М.: Физматлит, 2002. – 560 с.
3. *Бир Г.Л., Пикус Г.Е.* Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках / Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. – М.: Наука, 1972. – 584 с.
4. *Pikus G.* Superlattices and other heterostructures: symmetry and optical phenomena / G. Pikus, E. Ivchenko – Heidelberg: Springer-Verlag, 1997. – 372 p.
5. *Ivchenko E.L.* Optical Spectroscopy of Semiconductor Nanostructures / E.L. Ivchenko. – Berlin: Springer, 2004. – 427 p.
6. *Bastard G.* Wave mechanics applied to semiconductor heterostructures / G. Bastard. – Les Ulis: Les Editions de Physique, 1988. – 360 p.
7. *Воробьев Л.Е.* Оптические свойства наноструктур / Л.Е. Воробьев, Е.Л. Ивченко, Д.А. Фирсов, В.А. Шалыгин. – СПб.: Наука, 2001. – 188 с.
8. *Шик А.Я.* Физика низкоразмерных систем / А.Я. Шик, Л.Г. Бакуева, С.Ф. Мусихин, С.А. Рыков. – СПб.: Наука, 2001. – 160 с.
9. *Мигдал А.Б.* Качественные методы в квантовой теории / А.Б. Мигдал. – М.: Наука, 1975. – 335 с.
10. *Базь А.И.* Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике / А.И. Базь, Я.Б. Зельдович, А.М. Переломов. – М.: Наука, 1971. – 544 с.
11. *Силин А.П.* Полупроводниковые сверхрешетки / А.П. Силин // Успехи физических наук. – 1985. – Т. 147. – Вып. 3. – С. 485–521.
12. *Берестецкий В.Б.* Квантовая электродинамика / В.Б. Берестецкий, Е.М. Лифшиц, Л.П. Питаевский. – М.: Физматлит, 2002. – 720 с.
13. *Сурис Р.А.* Пограничные состояния в гетеропереходах / Р.А. Сурис // ФТП. – 1986. – Том 20. – Вып. 11. – С. 2008–2015.
14. *Сокольский А.В.* Переходы между зонами тяжелых и легких дырок и свойства поверхностных состояний / А.В. Сокольский, Р.А. Сурис // ФТП. – 1987. Том 21. – Вып. 5. – С. 866–870.

15. *Rodina A.V.* General boundary conditions for envelope function in the multiband kp -model / A.V. Rodina, A.Yu. Alekseev, Al.L. Efros, M. Rosen, B.K. Meyer // *Phys. Rev. B.* – 2002. – Vol. 65. – P. 125302.
16. *Gerchikov L.G.* Interface states in subband structure of semiconductor quantum well / L.G. Gerchikov, A.V. Subashiev // *Phys. Stat. Sol. (b).* – 1990. – Vol. 160. – P. 443–457.
17. *Дьяконов М.И.* Размерное квантование дырок в полупроводнике со сложной валентной зоной и носителей в бесщелевом полупроводнике / М.И. Дьяконов, А.В. Хаецкий // *ЖЭТФ.* – 1982. Том 82. – Вып. 5. – С. 1584–1590.
18. *Андо Т.* Электронные свойства двумерных систем / Т. Андо, А. Фаулер, Ф. Стерн. – М.: Мир, 1985. – 416 с.
19. *Ландау Л.Д.* Теория упругости / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М.: Физматлит, 2007. – 264 с.
20. *Shchukin V.A.* Spontaneous ordering of nanostructures on crystal surfaces / V.A. Shchukin, D. Bimberg // *Rev. Mod. Phys.* – 1999. – Vol. 71. – P. 1125–1171.
21. *Smith D.L.* Theory of semiconductor superlattice electronic structure / D.L. Smith, C. Mailhot // *Rev. Mod. Phys.* – 1990. – Vol. 62. – P. 173–234.
22. *Kriechbaum M.* Electronic structure of $\text{PbTe}/\text{Pb}_{1-x}\text{Sn}_x\text{Te}$ superlattices / M. Kriechbaum, K.E. Ambrosch, E.J. Fanter, H. Clemens, G. Bauer // *Phys. Rev. B.* – 1984. – Vol. 30. – P. 3394–3405.

Гасумянц Виталий Эдуардович
Лыков Сергей Николаевич
Пшенай-Северин Дмитрий Александрович
Рыков Сергей Александрович
Фирсов Дмитрий Анатольевич

РАЗМЕРНОЕ КВАНТОВАНИЕ
Часть 1. ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ СПЕКТР НАНОСТРУКТУР

Учебное пособие

Под редакцией *Лыкова Сергея Николаевича*

Лицензия ЛР № 020593 от 07.08.97

Налоговая льгота — Общероссийский классификатор продукции
ОК 005-93, т. 2; 95 3005 — учебная литература

Подписано в печать 26.12.2008. Формат 60×84/16. Печать цифровая.
Усл. печ. л. 16,25. Уч.-изд. л. 16,25. Тираж 100. Заказ 5586б.

Отпечатано с готового оригинал-макета, представленного авторами,
в Цифровом типографском центре Издательства Политехнического
университета.

195251, Санкт-Петербург, Политехническая ул., 29.

Тел.: (812) 550-40-14

Тел./факс: (812) 297-57-76